

УДК 519.63

Математическое моделирование динамики многокомпонентного газа с использованием WENO схем на примере пиролиза этана

© Р. В. Жалнин¹, Е. Е. Пескова², О. А. Стадниченко³, В. Ф. Тишкин⁴

Аннотация. В настоящей работе построена схема высокого порядка точности для моделирования ламинарного течения многокомпонентной смеси. Данная смесь представляет собой вязкий теплопроводный газ, в котором происходит химическая реакция пиролиза этана. Разработан и реализован параллельный вычислительный алгоритм с использованием технологии MPI. С целью верификации построенной схемы разработана программа для нахождения газодинамических параметров и концентраций веществ реакции пиролиза этана в замкнутом реакторе. Проведены расчеты течения газовой смеси в проточном металлическом реакторе с внешним обогревом реакционной зоны. Найдены распределения температуры, плотности и массовых концентраций реагентов в продольном разрезе реактора.

Ключевые слова: WENO схема, высокий порядок точности, технология MPI, пиролиз этана.

1. Введение

На сегодняшний день ведущим способом получения низших олефинов является термический пиролиз углеводородов. В Институте катализа имени Г.К. Борескова проводятся работы по созданию установок [1-3], использующих технологии пиролиза алканов в условиях интенсивных физических воздействий. Для детального изучения процессов пиролиза при различных условиях протекания реакции актуальной является задача математического моделирования таких процессов, которая позволит избежать пристрелочных этапов создания сложных и дорогостоящих установок. При построении разностных схем для выбранной математической модели необходимо использовать численные алгоритмы высокого порядка точности, чтобы получить результаты, наиболее точно описывающие исследуемый процесс. Также необходимо использовать технологии параллельных вычислений, так как при решении реальных задач приходится работать с большими областями данных. В данной статье проведено математическое моделирование пиролиза этана в реакторе с внешним обогревом реакционной зоны [3] с использованием схем высокого порядка точности [4]. Для сокращения времени расчетов был построен и реализован параллельный вычислительный алгоритм на основе технологии MPI.

¹ Заведующий кафедрой прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики, Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева, г. Саранск; zhrv@mrsu.ru

² Преподаватель кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики, Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева, г. Саранск; peskovae@apppmath.mrsu.ru

³ Научный сотрудник, Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск; zasypoa@catalysis.ru

⁴ Член-корр. РАН, заместитель директора по научной работе, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша, г. Москва; v.f.tishkin@mail.ru

2. Математическая модель и алгоритм дискретизации

Математическая модель течения многокомпонентного реагирующего газа в реакторе представляет собой систему уравнений, включающую уравнение неразрывности, уравнения сохранения импульса и энергии, уравнения неразрывности для каждой компоненты газовой смеси [5], которая подробно описана в работе [6].

В векторном виде данные уравнения, с учетом расщепления потоков на конвективные и диффузионные составляющие, можно представить следующим образом:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial (F^{(1)}(U) - H^{(1)}(U))}{\partial x} + \frac{\partial (F^{(2)}(U) - H^{(2)}(U))}{\partial y} = Q. \quad (2.1)$$

Здесь

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho Y_i \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}, \quad F^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u Y_i \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{pmatrix}, \quad F^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v Y_i \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{pmatrix},$$

$$H^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ J_{ix} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xx}u + \tau_{xy}v + q_x \end{pmatrix}, \quad H^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ J_{iy} \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yx}u + \tau_{yy}v + q_y \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 0 \\ Q_i \\ 0 \\ 0 \\ S_h \end{pmatrix},$$

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

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

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

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right), \quad i = 1, 2, \dots, M.$$

Здесь ρ – плотность, u, v – компоненты вектора скорости, Y_i – массовая концентрация i -ой компоненты, p – давление, $E = \rho \left(\epsilon + \frac{u^2 + v^2}{2} \right)$ – удельная полная энергия, T – температура, Q_i – скорость образования или расхода i -ой компоненты, J_{ix}, J_{iy} – компоненты вектора диффузионного потока i -ого вещества, q_x, q_y – компоненты вектора потока тепла для смеси, D_{mi} – коэффициент диффузии i -ой компоненты, h_i – энтальпия i -ой компоненты, λ – коэффициент теплопроводности смеси, μ – коэффициент динамической вязкости, S_h – нагрев или охлаждение в результате химической реакции.

Для построения дискретной модели используем равномерную сетку. Газодинамические параметры рассматриваем как интегральные средние в ячейках сетки.

Для аппроксимации системы уравнений (2.1) используем консервативную нелинейную дифференциально-разностную схему вида:

$$\begin{aligned} \frac{dU_{ij}}{dt} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{F}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{F}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_x} \\ - \left(\frac{\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{H}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{H}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_x} \right) = Q_{ij} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь $\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)}, \tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)}$ – конвективные потоки, которые рассчитываются по схеме Лакса-Фридрикса-Русанова [7, 8]:

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

$\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)}, \tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)}$ – диффузионные и тепловые потоки, которые рассчитываются по схеме с центральными разностями, \tilde{Q}_{ij} – среднее по ячейке значение источникового члена.

Для нахождения значений вектора переменных U слева и справа от границы между i и $i+1$ ячейками $U_{i+1/2j}^r, U_{i+1/2j}^l$, используем WENO схему пятого порядка точности, описанную в работе [4, 9].

Введем вектор примитивных переменных [10] $q = q(U) = (\rho, u, v, p)$. С помощью WENO алгоритма проведем его интерполяцию на границе между ячейками, а затем пересчитаем значение искомого вектора $U_{i+1/2j}^r = U(q_{i+1/2j}^r)$.

Интерполяцию на границе между ячейками проводим следующим образом [4]:

$$q_{i+1/2j} = \sum_{l=0}^{K-1} \omega_l q_{i+1/2j}^{(l)}. \quad (2.3)$$

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

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

Введение малой величины ϵ исключает случай обращения знаменателя в ноль, β_l – индикатор гладкости [4], d_l – коэффициенты полученные при интерполяции значения на границе ячейки на расширенном шаблоне $S_*^{(i)} = \{x_{i-K+1}, \dots, x_i, \dots, x_{i+K-1}\}$.

Для получения схемы пятого порядка точности полагаем $K = 3$, значения величин c_{lj}, d_l, β_l приведены в работе [4].

Дискретизация по времени выполняется по схеме Рунге-Кутты:

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

Шаг по времени выбирается, исходя из условий устойчивости [4, 5].

3. Модель химической реакции пиролиза этана

В таблице 1 представлена схема брутто-реакции пиролиза этана, предэкспоненциальный множитель A_i и энергия активации E_i для каждой элементарной стадии [11].

№	Стадия	$A_i, \frac{1}{c}$ или $\frac{л}{моль \cdot с}$	E_i
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

Таблица 1: Схема и кинетические параметры механизма брутто-реакции пиролиза этана

№	Стадия реакции	Скорость стадии
1	$B_1 \rightarrow B_2 + B_3$	$w_1 = A_1 e^{\left(\frac{-E_1}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_1}{M_{w_1}}\right)$
2	$2B_1 \rightarrow B_2 + 2B_4$	$w_2 = A_2 e^{\left(\frac{-E_2}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_1}{M_{w_1}}\right)^2$

Таблица 2: Кинетические уравнения для элементарных стадий реакции

Последовательность химических превращений и кинетические уравнения элементарных стадий приведены в таблице 2, где $B_1 = [C_2H_6]$, $B_2 = [C_2H_4]$, $B_3 = [H_2]$, $B_4 = [CH_4]$.

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

$$\begin{aligned} Q_1 &= M_{w_1} \cdot (-1 \cdot w_1 - 2 \cdot w_2), \\ Q_2 &= M_{w_2} \cdot (1 \cdot w_1 + 1 \cdot w_2), \\ Q_3 &= M_{w_3} \cdot (1 \cdot w_1), \\ Q_4 &= M_{w_4} \cdot (2 \cdot w_2). \end{aligned}$$

Коэффициенты для расчета удельной теплоемкости веществ C_p , параметры Леннарда-Джонса σ_i , $\left(\frac{\epsilon}{k_b}\right)_i$, необходимые для расчета коэффициента диффузии приведены в работе [3].

4. Параллельный вычислительный алгоритм

Параллельный вычислительный алгоритм построен на основе технологии для систем с распределенной памятью MPI (Message Passing Interface). Распараллеливание основано на геометрической декомпозиции расчетной области и распределении полученных подобластей по соответствующим процессорам или ядрам процессора. Алгоритм работы программного комплекса условно можно описать следующим образом.

При запуске программы происходит чтение начальных данных из файла и декомпозиция расчетной области (модуль *startup()*). Далее на каждом вычислительном узле происходит формирование массивов данных. В массивы записываются начальные условия для каждой области и формируются фиктивные ячейки для реализации граничных условий и межпроцессорных обменов.

На каждом шаге по времени запускается подпрограмма вычисления граничных условий *bnd_cond()*, которая записывает данные в фиктивные ячейки, если они являются

граничными в исходной области. Для заполнения фиктивных ячеек, расположенных на границе между процессорами, запускается подпрограмма *exch_bnd_cond()*, которая выполняет межпроцессорный обмен данными. Затем реализуется численный алгоритм расчета газодинамических величин. Расчеты ведутся, пока не будет достигнуто заданное время.

Через определенное число шагов выполняется подпрограмма *save_vtk()*, которая записывает результаты в файл в формате VTK для дальнейшей обработки и визуализации. Используются XML-форматы (PVTU и VTU) для параллельного вывода результатов независимо каждым процессором.

5. Вычислительный эксперимент

На рисунке 1 представлена упрощенная схема металлического реактора, разработанного в Институте катализа имени Г. К. Борескова [1-3].

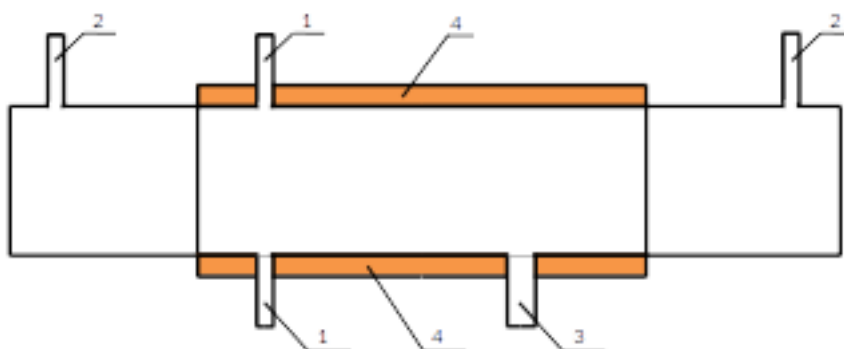


Рис. 1: Схема реактора. 1) вводы для подачи газовой смеси, диаметр – 4 мм; 2) вводы для подачи защитного газа метана CH_4 , диаметр – 4 мм; 3) выход газовой смеси, диаметр – 6 мм; 4) внешний нагреватель.

Общая длина реактора 220 мм, диаметр 21 мм, длина нагревательных элементов 70 мм.

Моделирование замкнутого реактора. Для верификации численного алгоритма предполагается, что реактор замкнут и нагрет до температуры 950К. В начальный момент времени область заполнена этаном, давление в области $p = 101325$ Па.

На рисунках 2 – 3 приведены графики изменения концентраций исходного продукта этана и целевого продукта пиролиза – этилена - во времени. Степень конверсии этана к моменту установления при указанных температурах составляет около 42%, что близко к наблюдаемым в экспериментах значениям конверсии – около 40%.

Моделирование проточного реактора. В начальный момент времени реактор заполнен метаном, температура $T = 300$ К. Через вводы (1) подается этан, температура $T = 600$ К. Через вводы (2) подается защитный газ метан, $T = 300$ К. Температура нагревательных элементов (4) $T = 1033$ К. Выход продуктов пиролиза осуществляется через выход (3).

В результате нагрева стенок температура этана становится достаточной для переработки газа в продукты реакции. Вследствие течения газа и химических реакций происходит перераспределение компонентов смеси по всему объему реактора. На рисунке 4 приведены распределения массовых долей компонент смеси. В буферных зонах преимущественно присутствует метан, наибольшая концентрация продуктов пиролиза наблюдается в правой части реакционной зоны, что объясняется движением продуктов в этом направлении и их накоплением. Поток метана, находящиеся в буферных зонах, не успевают охладить

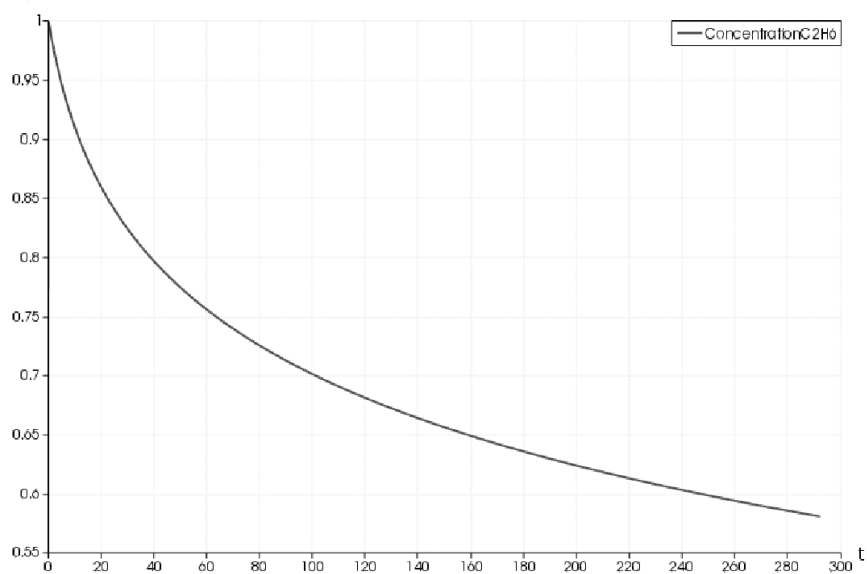


Рис. 2: Изменение концентрации этана

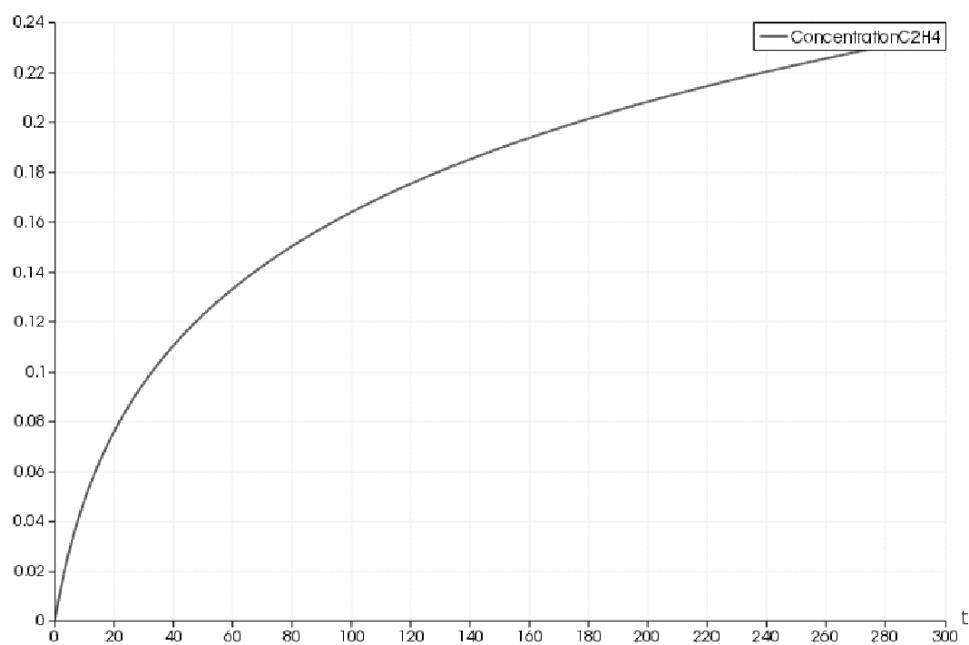


Рис. 3: Изменение концентрации этилена

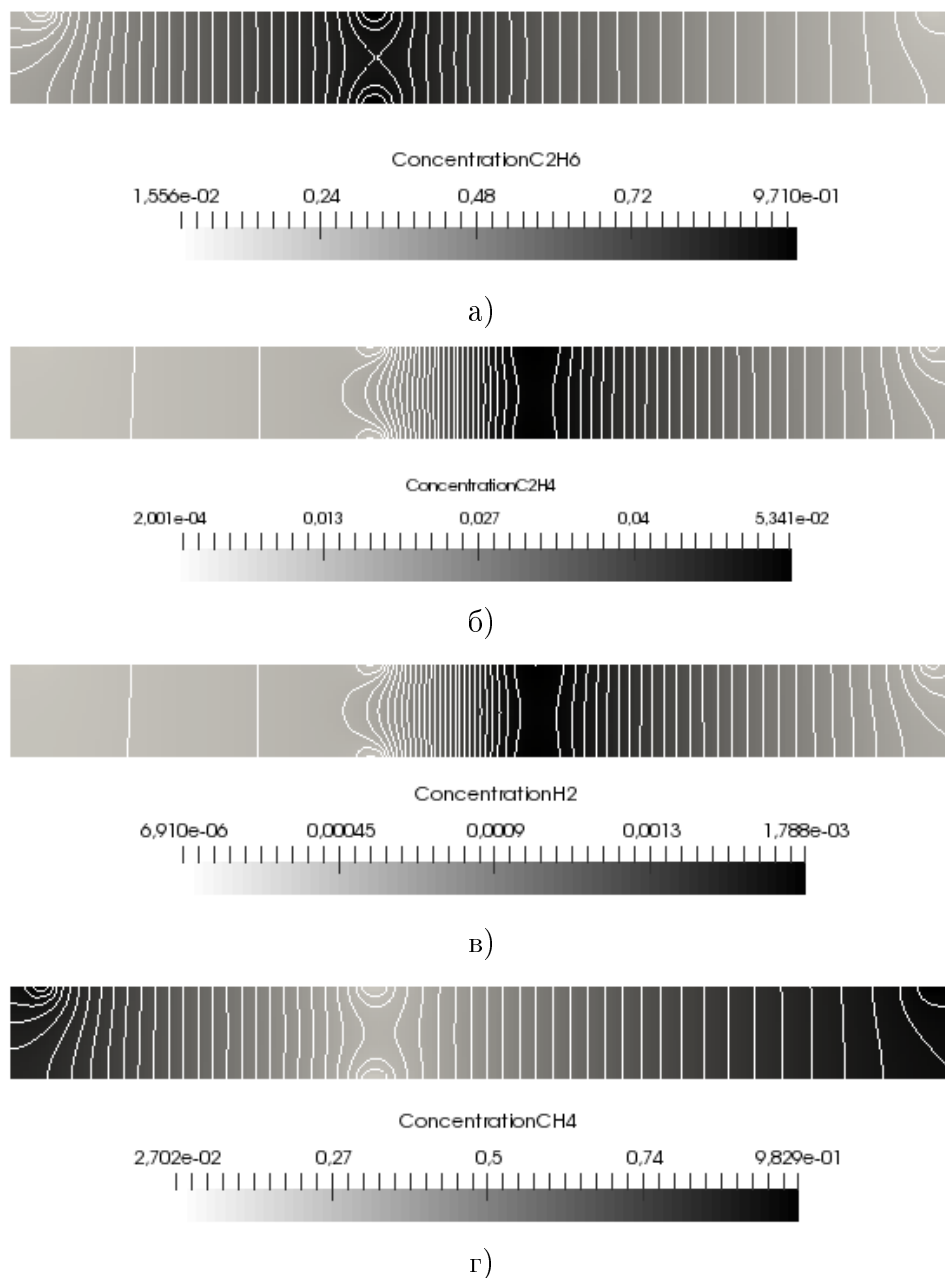


Рис. 4: Распределение и изолинии массовых долей C_2H_6 (а), C_2H_4 (б), H_2 (в), CH_4 (г)

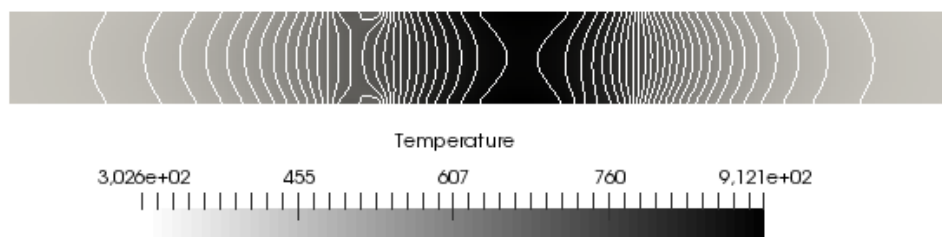


Рис. 5: Распределение и изолинии температуры

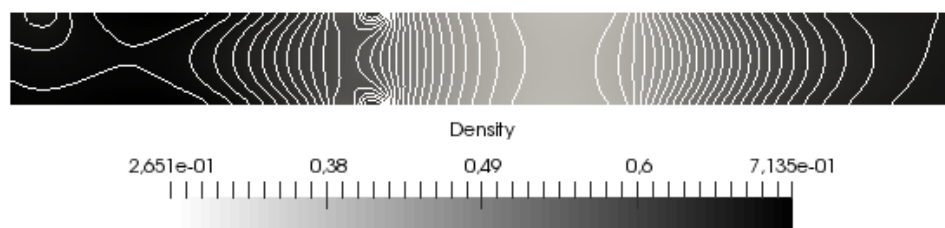


Рис. 6: Распределение и изолинии плотности

смесь в реакционной зоне, которая оснащена нагревательными элементами. На рисунке 5 изображено распределение температуры в продольном сечении реактора. Наибольшее значение равно 912 К, что ниже значения граничного условия. Это объясняется тем, что реакция пиролиза этана является эндотермической и проходит в условиях интенсивного поглощения энергии. Это приводит к снижению температуры газа в зонах переработки этана в продукты реакций. Максимальная температура наблюдается в пристеночных областях реакционной зоны (рисунок 5), за счет чего в этих областях химическая реакция происходит наиболее активно. Это подтверждают графики распределения водорода и этилена (рисунок 4 в и б), которые являются продуктами реакции. Большая концентрация метана вблизи торцевых стенок (рисунок 4 г) объясняется постоянным вводом защитного газа в эту область. Наибольшая плотность наблюдается на входах защитного и исходного газа, а также в областях буферных зон (рисунок 6). Такое распределение связано с тем, что газ по своим характеристикам близок к идеальному. В то же время в данном проточном реакторе давление равно атмосферному. Поэтому нагрев газа приводит к его разрежению.

6. Заключение

В работе построен вычислительный алгоритм на основе WENO-схемы пятого порядка точности для моделирования течения многокомпонентного газа с учетом химических реакций. Предложенная методика реализована в параллельном программном комплексе, разработанном с использованием технологии MPI. Выполнено моделирование процесса пиролиза этана в замкнутом и проточном реакторе в двумерной постановке. Результаты расчетов показали, что изменения концентраций веществ и поведение газодинамических параметров соответствуют основным физико-химическим законам. Однако для детального сопоставления расчетных и экспериментальных данных требуется уточнение геометрии реактора и кинетической схемы химической реакции.

Дата поступления 30.11.2016

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. V. N. Snytnikov, T. I. Mishchenko, Vl. N. Snytnikov, S. E. Malykhin, V. I. Avdeev, V. N. Parmon, "Autocatalytic gas-phase dehydrogenation of ethane", *Research on Chemical Intermediates*, **38** (2012), 1133 – 1147.
2. O. A. Stadnichenko, V. N. Snytnikov, Vl. N. Snytnikov, N. S. Masyuk, "Mathematical modeling of ethane pyrolysis in a flow reactor with allowance for laser radiation effects", *Chemical Engineering Research and Design*, **109** (2016), 405–413.

3. О. А. Стадниченко, В. Н. Снытников, Вл. Н. Снытников, “Математическое моделирование потоков многокомпонентного газа с энергоемкими химическими процессами на примере пиролиза этана”, *Вычислительные методы и программирование*, **15** (2014), 658-668.
4. C.-W. Shu, “Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws”, *ICASE Report 97-65*, 1997.
5. Э. Оран, Дж. Борис, *Численное моделирование реагирующих потоков*, Мир, М., 1990, 664 с.
6. И. М. Губайдуллин, Е. Е. Пескова, О. С. Язовцева, “Математическая модель динамики многокомпонентного газа на примере брутто-реакции пиролиза этана”, *Огарев-online*, **20** (2016), <http://journal.mrsu.ru/arts/matematicheskaya-model-dinamiki-mnogokomponentnogo-gaza-na-primere-brutto-reakcii-piroliza-etana>.
7. В. В. Русанов, “Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями”, *Журнал вычислительной математики и математической физики*, **1:2** (1961), 267 – 279.
8. P. D. Lax, “Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation”, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **7:1** (1954), 159 – 193.
9. Р. В. Жалнин, Н. В. Змитренко, М. Е. Ладонкина, В. Ф. Тишкин, “Численное моделирование развития неустойчивости Рихтмайера–Мешкова с использованием схем высокого порядка точности”, *Математическое моделирование*, **19:10** (2007), 61 – 66.
10. В. Ф. Тишкин, В. В. Никишин, И. В. Попов, А. П. Фаворский, “Разностные схемы трехмерной газовой динамики для задачи о развитии неустойчивости Рихтмайера–Мешкова”, *Математическое моделирование*, **7:5** (1995), 15 – 25.
11. Мухина Т.Н., Барабанов Н.Л., Бабаш С.Е. и др., *Пиролиз углеводородного сырья*, Химия, М., 1987, 240 с.

Using WENO schemes in mathematical modeling of gas mixture’s dynamics by the example of ethane pyrolysis

© R. V. Zhalnin⁵, E. E. Peskova⁶, O. A. Stadnichenko⁷, V. F. Tishkin⁸

Abstract. In this paper scheme with high order of precision is established for modeling of mixture’s laminar flow. This mixture is viscous heat-conducting gas where ethane pyrolysis reaction proceeds. Parallel computational algorithm using MPI technology is developed. To verify the scheme software is developed for calculation of reagent concentrations and gas-dynamic parameters for ethane pyrolysis in a closed reactor. Calculations are made for the gas flow in a metallic flow reactor with external heating of reaction zone. In reactor’s longitudinal section distributions of temperature, density and mass concentrations of reagents are found.

Key Words: WENO scheme, high order of accuracy, MPI technology, ethane pyrolysis

⁵ Head of Department of Applied Mathematics, Differential Equations and Theoretical Mechanics, National Research Ogarev Mordovia State University, Saransk; zhrv@mrsu.ru

⁶ Assistant Lecturer at Department of Applied Mathematics, Differential Equations and Theoretical Mechanics, National Research Ogarev Mordovia State University, Saransk; peskovaee@appmath.mrsu.ru

⁷ Researcher at Boreskov Institute of Catalysis, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk State University, Novosibirsk; zasypoa@catalysis.ru

⁸ Corresponding Member of Russian Academy of Sciences, Deputy director of Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow; v.f.tishkin@mail.ru