

УДК 519.63

© Р. В. Жалнин, Е. Е. Пескова, О. А. Стадниченко, В. Ф. Тишкин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО РЕАГИРУЮЩЕГО ГАЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМОВ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ¹

В работе построен алгоритм повышенного порядка точности на основе WENO схем для моделирования динамики многокомпонентного реагирующего газа с учетом процессов диффузии, теплопроводности и химических реакций. Проведены расчеты для течения газа в проточном реакторе для термического пиролиза этана с внешним обогревом реакционной зоны. В рассматриваемых течениях скорость движения газа много меньше скорости распространения звука в газовой смеси, что обуславливает использование уравнений Навье–Стокса в приближении малых чисел Маха для описания исследуемых процессов. Расчет уравнений химических реакций выделяется в отдельный шаг, где скорость реакции определяется на основе выражений Аррениуса. Для построения модели химической кинетики принята кинетическая схема пиролиза этана, представляющая собой разветвленный радикальный механизм. Проведены расчеты дозвукового течения газа с учетом процессов диффузии, химических реакций и их тепловых эффектов для различных температур нагревательных элементов. Сравнение с экспериментальными данными показало, что 1.97%-ная конверсия этана в расчетах достигается для 648 °С на выходе металлического реактора, что близко к экспериментальным значениям, составляющим 2.1%. Сравнение данных экспериментов по термическому пиролизу этана с данными, полученными в ходе вычислительного эксперимента, показало высокую степень достоверности полученных результатов.

Ключевые слова: уравнения Навье–Стокса, WENO схема, пиролиз этана.

DOI: [10.20537/vm170410](https://doi.org/10.20537/vm170410)

В Институте катализа имени Г. К. Борескова разрабатываются эффективные низкотемпературные технологии переработки углеводородов в режиме смешанной подачи энергии [1–3]. В настоящей работе рассматривается процесс пиролиза этана в режиме подачи энергии через внешний нагрев стенок реактора. Разработанный численный алгоритм моделирует процесс пиролиза этана в химическом реакторе, наблюдаемый экспериментально. Для моделирования газодинамических течений используется конечно-объемная схема повышенного порядка точности. На сегодняшний день различные схемы повышенного порядка точности успешно развиваются для решения систем законов сохранения [4–8]. В настоящей работе для реконструкции газодинамических параметров используется WENO схема пятого порядка точности [9, 10].

§ 1. Математическая модель

Лабораторные эксперименты, проводимые в Институте катализа имени Г. К. Борескова, характеризуются режимами течения с малыми числами Маха. Решение уравнений Навье–Стокса, описывающих подобные течения, без специальных модификаций численно неустойчивы [11–13]. Для описания дозвуковых течений многокомпонентной газовой смеси используется система уравнений Навье–Стокса в приближении малых чисел Маха [11–13]:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho Y_i \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_i + Q_i, \quad (1.1)$$

¹Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 17-71-30014) и частичной финансовой поддержке Минобрнауки России, базовая часть госзадания 1.6958.2017/8.9. Работа Стадниченко О. А. выполнена в рамках государственного задания ФГБУН ИК СО РАН (проект № 0303-2016-0017).

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \pi + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q}. \quad (1.3)$$

Система дополнена уравнением состояния и условием на дивергенцию вектора скорости:

$$p_0 = \rho RT \sum_i \frac{Y_i}{M_{wi}},$$

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

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

Вектор диффузионного потока компонента и вектор потока тепла для смеси определяются с использованием модели средних по смеси значений [11]:

$$\vec{J}_i = -\rho D_{im} \nabla Y_i,$$

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

Здесь D_{im} — средний по смеси коэффициент диффузии i -й компоненты смеси, λ — коэффициент теплопроводности смеси, h_i — энтальпия i -й компоненты смеси.

Средний по смеси коэффициент диффузии рассчитывается по формуле

$$D_{im} = \frac{1 - X_i}{\sum_{i \neq j} \frac{X_j}{D_{ji}}}, \quad D_{ji} = 2,628 \cdot 10^{-7} \sqrt{\frac{T^3 (M_{wi} + M_{wj})}{2 M_{wi} M_{wj}}} \frac{1}{\rho \sigma_{ij}^2 \Omega_D (T_D^*)}.$$

Здесь X_i — мольная доля i -й компоненты газа, D_{ji} — бинарный коэффициент диффузии, σ_{ij} — диаметр сечения соударений, $\Omega_D (T_D^*)$ — момент от интеграла столкновений частиц сорта i и j .

Для нахождения энтальпии i -й компоненты газовой смеси используется выражение

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

Здесь h_i^0 — энтальпия образования i -й компоненты при стандартной температуре $T_0 = 298,15^\circ\text{K}$, C_{pi} — удельная теплоемкость i -й компоненты при постоянном давлении, задается многочленом, аппроксимирующим известные термодинамические табличные данные в нужном интервале температур [1, 3].

Тензор вязких напряжений имеет вид

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

где μ — коэффициент динамической вязкости.

Для более точного расчета температурного поля используются температурные зависимости для коэффициентов теплопроводности и вязкости каждой компоненты смеси, предложенные в [1, 3].

§ 2. Вычислительный алгоритм

Для построения дискретной модели вводится сетка, равномерная по каждому направлению:

$$\begin{aligned}\omega_{\Delta} &= \omega_{\Delta x} \times \omega_{\Delta y}, \\ \omega_{\Delta x} &= \{\Delta_i, i = 1, \dots, N_x, \Delta_i = [x_{i-1}, x_i], |\Delta_i| = x_i - x_{i-1} = h_x, h_x N_x = L_x\}, \\ \omega_{\Delta y} &= \{\Delta_j, j = 1, \dots, N_y, \Delta_j = [y_{j-1}, y_j], |\Delta_j| = y_j - y_{j-1} = h_y, h_y N_y = L_y\},\end{aligned}$$

где $L_{x(y)}$ — размеры расчетной области вдоль осей $\{x, y\}$. Все газодинамические параметры рассматриваются как интегральные средние в ячейках сетки.

Используется процедура расщепления по физическим процессам, которая заключается в том, что учет химических реакций выделяется в отдельный шаг, на котором решается следующая система уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = Q_i, \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_i Q_i h_i. \end{cases} \quad (2.1)$$

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

$$Q_i = M_{wi} \sum_{n=1}^N \nu_{in} w_n.$$

Здесь ν_{in} — стехиометрические коэффициенты компонента i в стадии n ; w_n — скорость элементарной стадии реакции:

$$w_n = k_n \prod_{i=1}^M \left(\frac{\rho Y_i}{M_{wi}} \right)^{\nu_{in}},$$

k_n — константа скорости элементарной стадии реакции, которая определяется из уравнения Аррениуса:

$$k_n = A_n e^{-\frac{E_n}{RT}}.$$

Здесь A_n — предэкспоненциальный множитель, E_n — энергия активации.

Для описания химических превращений реакции пиролиза этана принята радикальная автотокаталитическая схема, включающая $N = 15$ стадий реакции и $M = 12$ компонент смеси [1, 14].

Для решения уравнений химической кинетики используется специализированная явная схема, основанная на специфическом виде задач химической кинетики, предложенная в [15]. Систему дифференциальных уравнений, описывающую химические превращения в (2.1), можно записать в следующем виде [15]:

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

Здесь $c_i = \frac{\rho Y_i}{M_i}$, $c_i \geq 0$, $\phi_i(\mathbf{c}) \geq 0$, $\psi_i(\mathbf{c}) \geq 0$.

Таблица 1. Схема реакции и кинетические параметры

№	Стадия	$\lg A_i, \frac{1}{c}$ или $\frac{\text{л}}{\text{моль}\cdot\text{с}}$	$E_i \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$
1	$C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + CH_3^\bullet$	16.0	360.0
2	$CH_3^\bullet + C_2H_6 \rightarrow CH_4 + C_2H_5^\bullet$	10.0	50.0
3	$C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + H^\bullet$	13.5	170.0
4	$H^\bullet + C_2H_6 \rightarrow H_2 + C_2H_5^\bullet$	9.65	40.0
5	$H^\bullet + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5^\bullet$	10.4	8.4
6	$CH_3^\bullet + C_2H_4 \rightarrow n - C_3H_7^\bullet$	10.9	33.0
7	$n - C_3H_7^\bullet \rightarrow CH_3^\bullet + C_2H_4$	13.9	137.0
8	$C_2H_5^\bullet + C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + C_2H_6$	10.0	8.4
9	$n - C_3H_7^\bullet + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5^\bullet + C_3H_6$	7.4	27.6
10	$CH_3^\bullet + C_2H_4 \rightarrow CH_4 + C_2H_3^\bullet$	8.6	35.0
11	$CH_3^\bullet + C_2H_3^\bullet \rightarrow CH_4 + C_2H_2$	9.95	3.2
12	$C_2H_3^\bullet + H^\bullet \rightarrow C_2H_2 + H_2$	10.0	0.0
13	$C_2H_4 \rightarrow \bullet C_2H_4$	14.5	253.0
14	$\bullet C_2H_4 + C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + n - C_3H_7^\bullet$	14.0	216.0
15	$\bullet C_2H_4 \rightarrow C_2H_4$	5.38	0.0

Решение данной системы находится простыми итерациями, при этом необходимо выполнить только две итерации [15]:

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

Здесь c_i — решение в исходный момент времени, \hat{c}_i — решение в новый момент времени.

Систему уравнений (1.1)–(1.3) с учетом расщепления по физическим процессам можно представить в векторном виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial (F^{(1)}(U) - H^{(1)}(U))}{\partial x} + \frac{\partial (F^{(2)}(U) - H^{(2)}(U))}{\partial y} = 0. \tag{2.2}$$

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

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

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

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

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

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

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

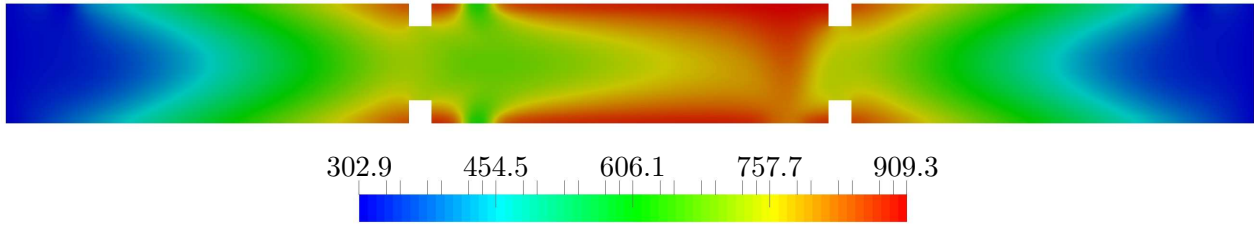


Рис. 1. Распределение температуры

Здесь $i = 1, 2, \dots, M$, M — количество компонент в газовой смеси.

Для численного решения системы (2.2) используется консервативная нелинейная дифференциально-разностная схема вида

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

Здесь $\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} = \tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^r, U_{i+1/2j}^l)$, $\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} = \tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^r, U_{ij+1/2}^l)$ — конвективные потоки, которые рассчитываются по схеме Лакса–Фридрихса–Русанова [16, 17]; $\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)}$, $\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)}$ — диффузионные и тепловые потоки, которые рассчитываются по схеме с центральными разностями; $U_{i+1/2j}^r$, $U_{i+1/2j}^l$ — значения вектора переменных U слева и справа от границы между i -й и $i+1$ -й ячейками, которые находятся с использованием WENO алгоритма пятого порядка точности [9, 10].

Вычисленное таким образом поле скорости на следующем шаге по времени \vec{v}^* не удовлетворяет условию для дивергенции скорости (1.4) [11], поэтому оно должно быть скорректировано после вычисления динамической составляющей давления π^{n+1} :

$$\vec{v}^{n+1} = \vec{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \pi^{n+1}.$$

Уравнение для динамической составляющей давления выглядит следующим образом [11]:

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

§ 3. Результаты вычислительного эксперимента

Для проведения вычислительного эксперимента принимаем следующую постановку задачи. Геометрия реактора, описанного в работах [1–3], включает в себя два ввода для реагирующей смеси, два ввода для защитного газа, одну выходную трубу для продуктов пиролиза. Реакционная зона оснащена нагревательными элементами.

В начальный момент времени реактор заполнен метаном комнатной температуры $T = 27^\circ\text{C}$, давление в области $p = 101325.0$ Па. На вводах реагирующей смеси подается газ этан с расходом 0.754 мг/с, температура газа $T = 327^\circ\text{C}$, на вводах защитного газа подается метан с расходом 0.316 мг/с, температура газа $T = 27^\circ\text{C}$. Температура нагревательных элементов $T = 642^\circ\text{C}$, температура корпуса вне нагревателя изменяется по линейному закону от 642°C до 27°C к торцевым стенкам.

На основе построенного алгоритма [18] доработан разрабатываемый программный комплекс [19] и с описанными начальными данными получены распределения плотности, температуры, массовых долей продуктов пиролиза и исходной газовой смеси по всему объему реактора (рис. 1–3).

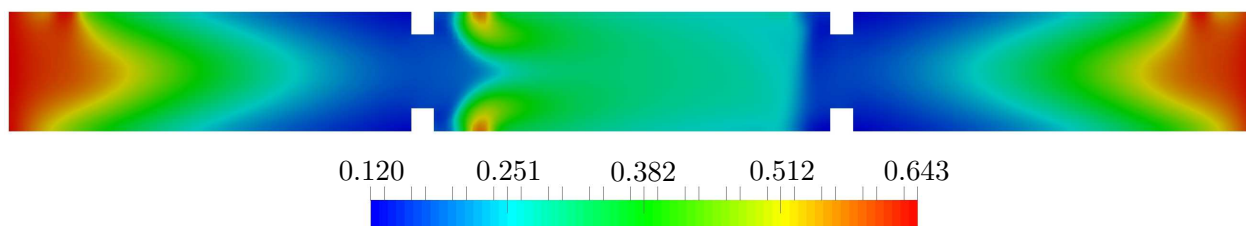


Рис. 2. Распределение плотности

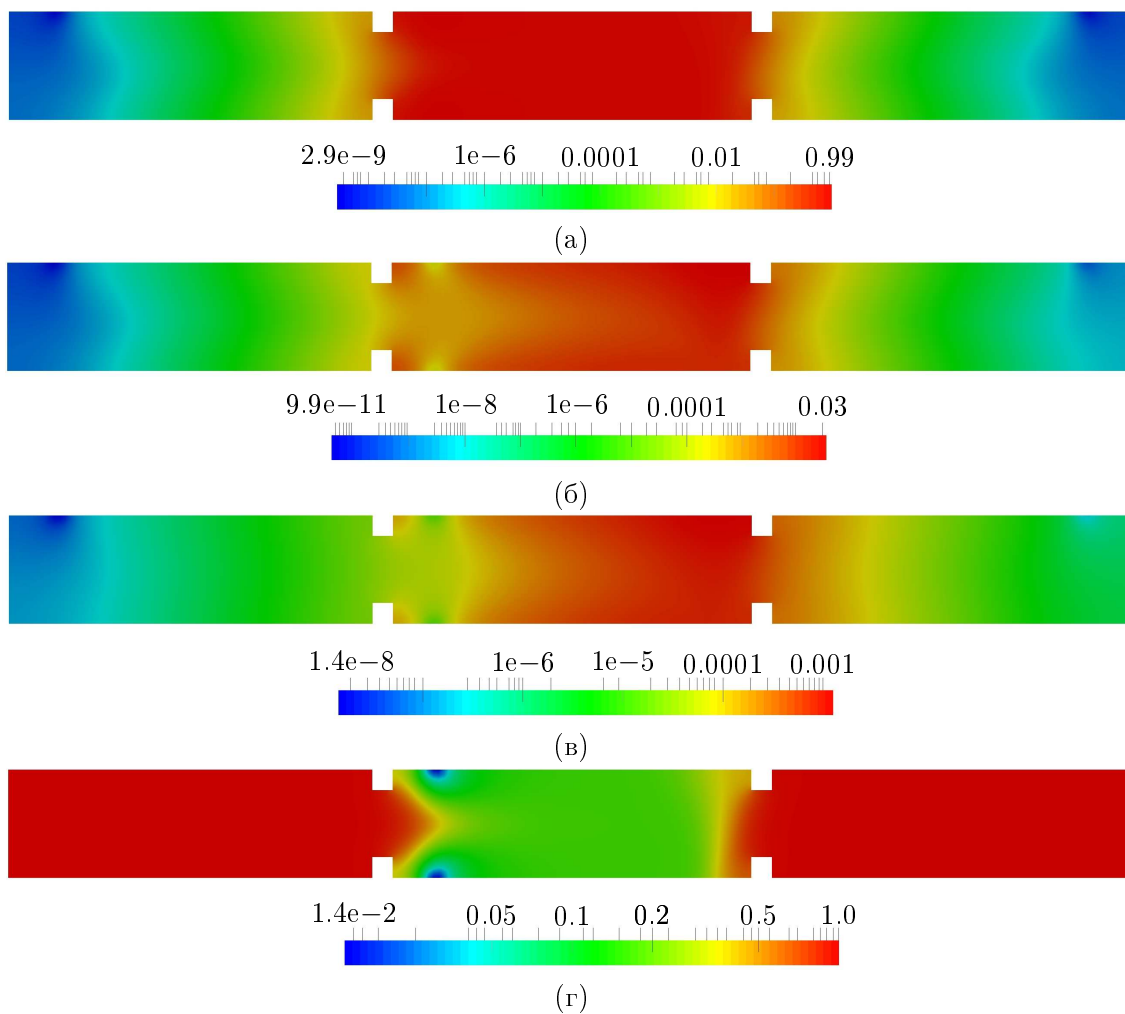


Рис. 3. Распределение и изолинии массовых долей C_2H_6 (а), C_2H_4 (б), H_2 (в), CH_4 (г)

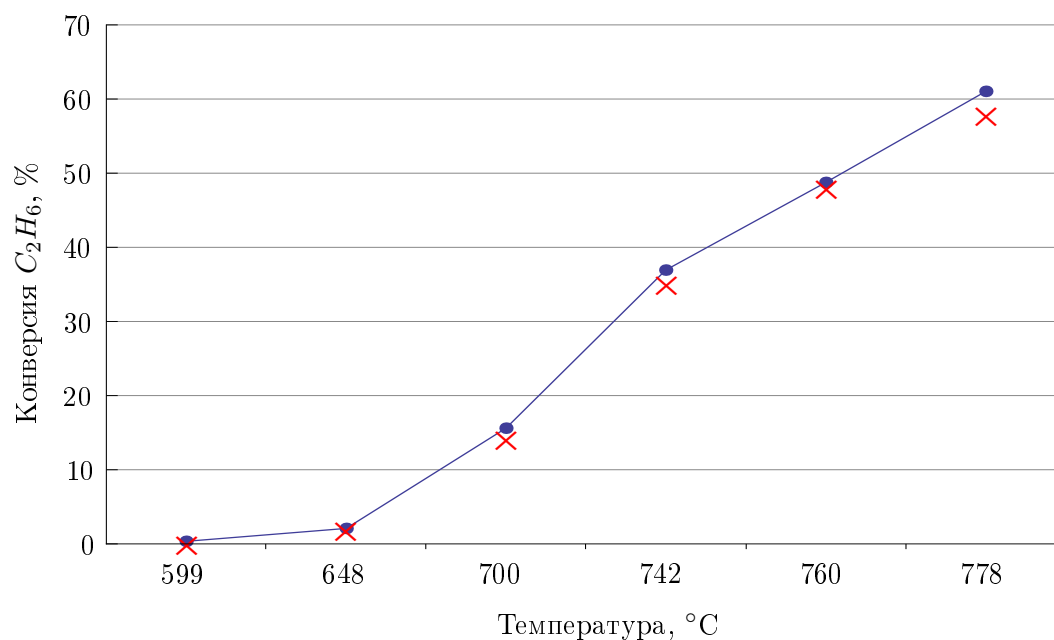


Рис. 4. Зависимость конверсии этана от температуры нагревательных элементов. Данные экспериментов — точки; данные моделирования — крестики

В результате нагрева стенок реактора температура подаваемого этана становится достаточной для запуска химической реакции и образования продуктов пиролиза. Максимальная температура газовой смеси наблюдается в областях нагревательных элементов и в правой части реакционной зоны, так как газ в этой области успевает прогреться, а следовательно, в этих областях химические превращения протекают наиболее интенсивно. Так как реакция пиролиза этана является эндотермической, температура реагирующего газа всегда будет ниже температуры нагревательных элементов (рис. 1). Поскольку давление внутри реактора равно атмосферному, нагрев газа приводит к его разрежению, следовательно, максимальное значение плотности наблюдается на вводах газовой смеси, а также в областях торцевых стенок, что демонстрирует рис. 2. В буферных зонах преимущественно присутствует метан за счет постоянной подачи его через вводы (рис. 3, а), наибольшая концентрация целевых продуктов пиролиза — этилена и водорода (рис. 3, б и в) наблюдается в правой части реакционной зоны, что объясняется максимальной температурой в этой области, движением продуктов в этом направлении и их накоплением. За счет диффузии газа продукты пиролиза наблюдаются в буферных зонах.

Для сопоставления экспериментальных [1] и расчетных данных приведена зависимость конверсии этана от температуры нагревательных элементов (рис. 4), график демонстрирует хорошее совпадение данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Стадниченко О.А., Снытников В.Н., Снытников Вл.Н. Математическое моделирование потоков многокомпонентного газа с энергоемкими химическими процессами на примере пиролиза этана // Вычислительные методы и программирование. 2014. Т. 15. № 4. С. 658–668.
2. Snytnikov V.N., Mishchenko T.I., Snytnikov V.N., Malykhin S.E., Avdeev V.I., Parmon V.N. Autocatalytic gas-phase dehydrogenation of ethane // Research on Chemical Intermediates. 2012. Vol. 38. No. 3–5. P. 1133–1147. DOI: [10.1007/s11164-011-0449-x](https://doi.org/10.1007/s11164-011-0449-x)
3. Stadnichenko O.A., Snytnikov V.N., Snytnikov Vl.N., Masyuk N.S. Mathematical modeling of ethane pyrolysis in a flow reactor with allowance for laser radiation effects // Chemical Engineering Research and Design. 2016. Vol. 109. P. 405–413. DOI: [10.1016/j.cherd.2016.02.008](https://doi.org/10.1016/j.cherd.2016.02.008)

4. Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тишкин В.Ф., Чеванин В.С. Об одном варианте существенно неосциллирующих разностных схем высокого порядка точности для систем законов сохранения // Математическое моделирование. 2009. Т. 21. № 11. С. 19–32.
5. Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тишкин В.Ф. Исследование влияния лимитера на порядок точности решения разрывным методом Галёркина // Математическое моделирование. 2012. Т. 24. № 12. С. 124–128.
6. Родионов А.В. О взаимосвязи разрывного метода Галёркина со схемами MUSCL-типа // Математическое моделирование. 2015. Т. 27. № 10. С. 96–116.
7. Тишкин В.Ф., Жуков В.Т., Мышецкая Е.Е. К обоснованию схемы Годунова в многомерном случае // Математическое моделирование. 2016. Т. 28. № 2. С. 86–96.
8. Шумихин А.А., Королева М.Р., Дадикина С.Ю., Карпов А.И. Использование схемы WENO для моделирования турбулентного течения в канале с обратным уступом // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2017. Т. 27. Вып. 3. С. 460–469.
DOI: [10.20537/vm170313](https://doi.org/10.20537/vm170313)
9. Shu C.W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // ICASE Report No. 97–65, NASA-CR/97-206253. 1997. 83 p.
<https://ntrs.nasa.gov/archive/nasa/casi.ntrs.nasa.gov/19980007543.pdf>
10. 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.
11. 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.
<http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-2/articles/544/>
12. 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. Vol. 142. Issue 1. P. 1–46. DOI: [10.1006/jcph.1998.5890](https://doi.org/10.1006/jcph.1998.5890)
13. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling. 2000. Vol. 4. Issue 4. P. 535–556. DOI: [10.1088/1364-7830/4/4/309](https://doi.org/10.1088/1364-7830/4/4/309)
14. 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. Vol. 9. Issue 2. P. 143–154. DOI: [10.1515/cppm-2014-0008](https://doi.org/10.1515/cppm-2014-0008)
15. Белов А.А., Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Моделирование химической кинетики в газах // Математическое моделирование. 2016. Т. 28. № 8. С. 46–64.
16. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1961. Т. 1. № 2. P. 267–279.
17. Lax P.D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1954. Vol. 7. Issue 1. P. 159–193.
DOI: [10.1002/cpa.3160070112](https://doi.org/10.1002/cpa.3160070112)
18. 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. DOI: [10.20948/prepr-2017-101](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-101)
19. 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.

Поступила в редакцию 18.10.2017

Жалнин Руслан Викторович, к. ф.-м. н., заведующий кафедрой, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет, 430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, 68.
E-mail: zhrv@mrsu.ru

Пескова Елизавета Евгеньевна, старший преподаватель, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет, 430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, 68.
E-mail: e.e.peskova@mail.ru

Стадниченко Ольга Алексеевна, к. ф.-м. н., научный сотрудник, Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 5.

E-mail: zasypoa@catalysis.ru

Тишкин Владимир Федорович, д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН, заместитель директора по научной работе, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 125047, Россия, г. Москва, Миусская пл., 4.

E-mail: v.f.tishkin@mail.ru

R. V. Zhalnin, E. E. Peskova, O. A. Stadnichenko, V. F. Tishkin

Modeling the flow of a multicomponent reactive gas using high accuracy algorithms

Citation: *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2017, vol. 27, issue 4, pp. 608–617 (in Russian).

Keywords: Navier–Stokes equations, WENO scheme, pyrolysis of ethane.

MSC2010: 35Q30, 76N15

DOI: [10.20537/vm170410](https://doi.org/10.20537/vm170410)

The article considers a high-order accuracy algorithm for modelling the dynamics of multicomponent reactive gas taking into account the processes of diffusion, thermal conductivity and chemical reactions, based on WENO schemes. Computations for gas flow in a flowing reactor for thermal ethane pyrolysis with external heating of the reaction zone are carried out. The velocity of gas motion in explored flows is much less than sound velocity in gas mixture, which motivates using the Navier–Stokes equations in approximation of low Mach numbers for describing the processes under study. Computation of chemical kinetics equations is singled out as a separate step. The velocity of chemical reactions is defined by Arrhenius expressions. The ethane pyrolysis kinetic scheme is used for constructing the model, which is a branched radical mechanism. Computations of subsonic gas flow taking into account the processes of diffusion, chemical reactions and their thermal effects for different temperature of heating elements are carried out. Comparison with experimental data shows that 1.97 % conversion of ethane is reached at 648°C at the outflow of metal reactor. This result is close to 2.1 %, which is obtained by experiment. Comparison of experimental data of thermal ethane pyrolysis with numerical experimental data shows a high level of reliability of the results obtained.

REFERENCES

1. Stadnichenko O.A., Snytnikov V.N., Snytnikov V.I.N. Mathematical modeling of multicomponent gas flows with energy intensive chemical processes by the example of ethane pyrolysis, *Vychislitel'nye Metody i Programirovanie*, 2014, vol. 15, no. 4, pp. 658–668 (in Russian).
2. Snytnikov V.N., Mishchenko T.I., Snytnikov V.N., Malykhin S.E., Avdeev V.I., Parmon V.N. Autocatalytic gas-phase dehydrogenation of ethane, *Research on Chemical Intermediates*, 2012, vol. 38, no. 3–5, pp. 1133–1147. DOI: [10.1007/s11164-011-0449-x](https://doi.org/10.1007/s11164-011-0449-x)
3. 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, vol. 109, pp. 405–413. DOI: [10.1016/j.cherd.2016.02.008](https://doi.org/10.1016/j.cherd.2016.02.008)
4. Ladonkina M.E., Neklyudova O.A., Tishkin V.F., Chevanin V.S. A version of essentially nonoscillatory high-order accurate difference schemes for systems of conservation laws, *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2010, vol. 2, no. 3, pp. 304–316. DOI: [10.1134/S207004821003004X](https://doi.org/10.1134/S207004821003004X)
5. Ladonkina M.E., Neklyudova O.A., Tishkin V.F. Impact of different limiting functions on the order of solution obtained by RKDG, *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2013, vol. 5, no. 4, pp. 346–349. DOI: [10.1134/S2070048213040091](https://doi.org/10.1134/S2070048213040091)
6. Rodionov A.V. Correlation between the discontinuous Galerkin method and MUSCL-type schemes, *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2016, vol. 8, no. 3, pp. 285–300. DOI: [10.1134/S207004821603008X](https://doi.org/10.1134/S207004821603008X)
7. Tishkin V.F., Zhukov V.T., Myshetskaya E.E. Justification of Godunov's scheme in the multidimensional case, *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2016, vol. 8, no. 5, pp. 548–556. DOI: [10.1134/S2070048216050124](https://doi.org/10.1134/S2070048216050124)
8. Shumikhin A.A., Koroleva M.R., Dadikina S.Yu., Karpov A.I. Application of WENO scheme for simulation of turbulent flow in a channel with backward-facing step, *Vestnik Udmurtskogo Universiteta*.

- Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2017, vol. 27, issue 3, pp. 460–469.
DOI: [10.20537/vm170313](https://doi.org/10.20537/vm170313)
9. Shu C.W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws, ICASE Report No. 97-65, NASA-CR/97-206253, 1997, 83 p.
<https://ntrs.nasa.gov/archive/nasa/casi.ntrs.nasa.gov/19980007543.pdf>
 10. Zhalnin R.V., Zmitrenko N.V., Ladonkina M.Ye., Tishkin V.F. Numerical simulation Richtmyer–Meshkov instability development using difference schemes of high order of accuracy, *Matematicheskoe Modelirovaniye*, 2007, vol. 19, no. 10, pp. 61–66 (in Russian).
 11. Borisov V.E., Yakush S.E. Application of adaptive hierarchical grids to simulation of reacting gas flows, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2015, vol. 16, issue 2 (in Russian).
<http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-2/articles/544/>
 12. 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, vol. 142, issue 1, pp. 1–46. DOI: [10.1006/jcph.1998.5890](https://doi.org/10.1006/jcph.1998.5890)
 13. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry, *Combustion Theory and Modelling*, 2000, vol. 4, issue 4, pp. 535–556. DOI: [10.1088/1364-7830/4/4/309](https://doi.org/10.1088/1364-7830/4/4/309)
 14. 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, vol. 9, issue 2, pp. 143–154. DOI: [10.1515/cppm-2014-0008](https://doi.org/10.1515/cppm-2014-0008)
 15. Belov A.A., Kalitkin N.N., Kuzmina L.V. Modeling of chemical kinetics in gases, *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2017, vol. 9, no. 1, pp. 24–39. DOI: [10.1134/S2070048217010057](https://doi.org/10.1134/S2070048217010057)
 16. Rusanov V.V. The calculation of the interaction of non-stationary shock waves and obstacles, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1962, vol. 1, issue 2, pp. 304–320.
DOI: [10.1016/0041-5553\(62\)90062-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(62)90062-9)
 17. Lax P.D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1954, vol. 7, issue 1, pp. 159–193. DOI: [10.1002/cpa.3160070112](https://doi.org/10.1002/cpa.3160070112)
 18. Zhalnin R.V., Peskova E.E., Stadnichenko O.A., Tishkin V.F. Modeling the flow of multicomponent reactive gas by the example of hydrocarbons pyrolysis, *Keldysh Institute Preprints*, 2017, no. 101, pp. 1–16. DOI: [10.20948/prepr-2017-101](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-101)
 19. Zhalnin R.V., Peskova E.E., Stadnichenko O.A., Tishkin V.F. Using WENO schemes in mathematical modeling of gas mixture's dynamics by the example of ethane pyrolysis, *Zhurnal Srednevolzhskogo Matematicheskogo Obshchestva*, 2016, vol. 18, no. 3, pp. 98–106 (in Russian).

Received 18.10.2017

Zhalnin Ruslan Viktorovich, Candidate of Physics and Mathematics, Head of Department, Ogarev Mordovia State University, ul. Bol'shevistskaya, 68, Saransk, 430005, Russia.

E-mail: zhrv@mrsu.ru

Peskova Elizaveta Evgen'evna, Senior Lecturer, Ogarev Mordovia State University, ul. Bolshevistskaya, 68, Saransk, 430005, Russia.

E-mail: e.e.peskova@mail.ru

Stadnichenko Olga Alekseevna, Candidate of Physics and Mathematics, Researcher, Borekov Institute of Catalysis, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, pr. Lavrentieva, 5, Novosibirsk, 630090, Russia.

E-mail: zasypoa@catalysis.ru

Tishkin Vladimir Fedorovich, Doctor of Physics and Mathematics, Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, Deputy Director, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Miusskaya pl., 4, Moscow, 125047, Russia.

E-mail: v.f.tishkin@mail.ru