

УДК 519.63

Моделирование течения многокомпонентной реагирующей газовой смеси с использованием алгоритмов повышенного порядка точности

Р. В. Жалнин¹, Е. Е. Пескова¹, О. А. Стадниченко², В. Ф. Тишкин³
ФГБОУ ВО "МГУ им. Н. П. Огарёва"¹, ИК им. Г.К. Борескова СО РАН²,
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН³

В настоящей работе построен алгоритм на основе схем повышенного порядка точности для моделирования течения химически активного газа с учетом процессов вязкости, теплопроводности, диффузии. Для описания математической модели дозвукового течения газовой смеси используются уравнения Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [1–3]. Проведено моделирование процесса пиролиза этана в проточном химическом реакторе за счет внешнего обогрева стенок [4]. Получены картины распределения плотности, скорости, температуры, концентраций компонент смеси.

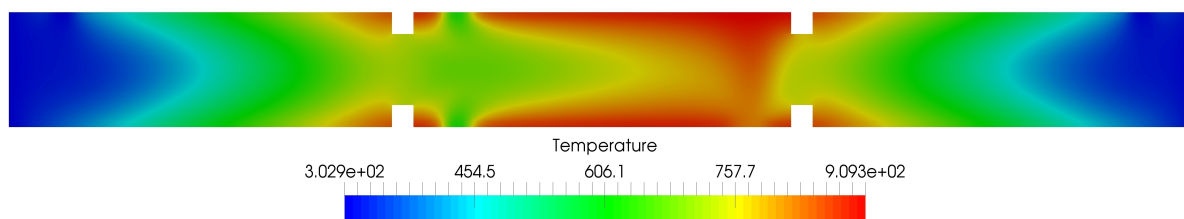


Рис. 1. Распределение температуры

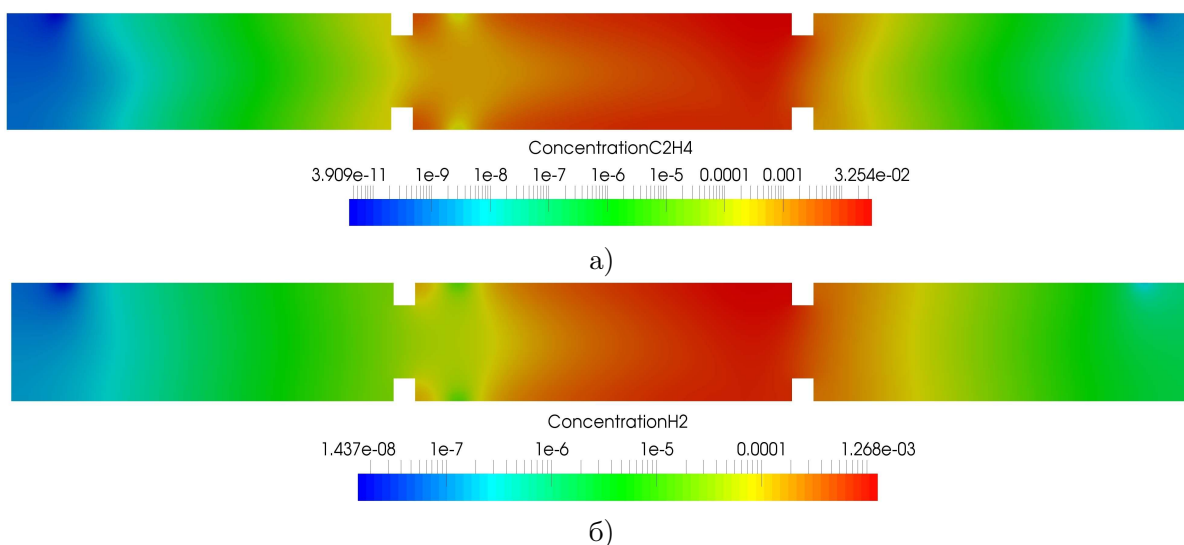


Рис. 2. Распределение массовых долей C₂H₄ (а), H₂ (б)

На рисунках представлены распределения массовой доли целевых продуктов реакции – этилена и водорода и температуры в продольном срезе химического реактора. Макси-

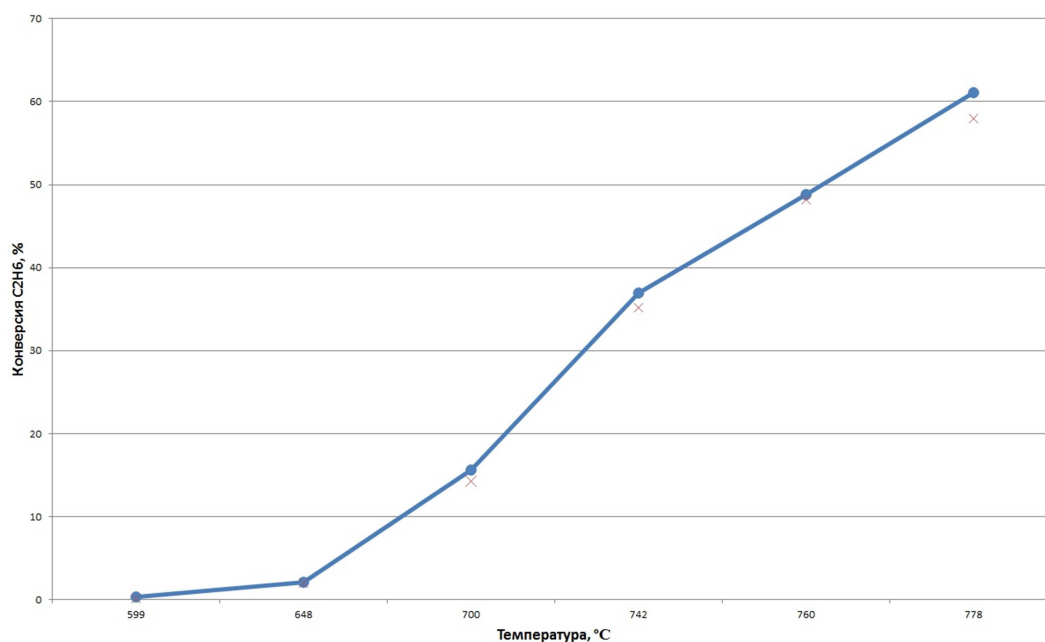


Рис. 3. Зависимость конверсии этана от температуры нагревательных элементов. Данные экспериментов — точки; данные моделирования — крестики

мальная концентрация целевых продуктов наблюдается в областях максимальной температуры, т.к. реакция в этих областях происходит наиболее интенсивно. Сопоставление результатов вычислительного и натурального экспериментов показало высокую достоверность вычислительных данных (рис. 3). Полученные результаты исследований можно использовать при анализе влияния состава газовой смеси, температуры проведения реакции, размеров химико-технологической установки для максимального выхода продуктов реакции. Построенный алгоритм доступен к применению для широкого класса задач химической промышленности.

Литература

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. 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.

MSC 35Q30 76N15

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

R.V. Zhalnin ¹, E.E. Peskova ¹, O.A. Stadnidchenko ², V.F. Tishkin ³

National Research Mordovia State University ¹, Boreskov Institute of Catalysis SB RAS², Keldysh Institute of Applied Mathematics ³