

УДК: 519.63

## Вычислительный алгоритм для изучения внутренних ламинарных потоков многокомпонентного газа с разномасштабными химическими процессами

Е. Е. Пескова<sup>1,2,a</sup>, В. Н. Снытников<sup>1,b</sup>, Р. В. Жалнин<sup>2,c</sup>

<sup>1</sup>Институт катализа СО РАН,  
Россия, 630090, г. Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, д. 5

<sup>2</sup>Национальный исследовательский мордовский государственный университет,  
Россия, 430005, г. Саранск, ул. Большевикская, д. 68

E-mail: <sup>a</sup> e.e.peskova@mail.ru, <sup>b</sup> snyt@catalysis.ru, <sup>c</sup> zhrv@mrsu.ru

Получено 04.10.2022, после доработки — 15.07.2023.  
Принято к публикации 27.07.2023.

Разработан вычислительный алгоритм для изучения химических процессов во внутренних течениях многокомпонентного газа при воздействии лазерного излучения. Математическая модель представляет собой уравнения газовой динамики с химическими реакциями при малых числах Маха с учетом диссипативных членов, которые описывают динамику вязкой теплопроводной среды с диффузией, химическими реакциями и подводом энергии посредством лазерного излучения. Для данной математической модели характерно наличие нескольких сильно различающихся между собой временных и пространственных масштабов. Вычислительный алгоритм построен на основе схемы расщепления по физическим процессам. Каждый шаг интегрирования по времени разбивается на следующие блоки: решение уравнений химической кинетики, решение уравнения для интенсивности излучения, решение уравнений конвекции – диффузии, расчет динамической составляющей давления и расчет коррекции вектора скорости. Решение жесткой системы уравнений химической кинетики проводится с помощью специализированной явной схемы второго порядка точности или подключаемым модулем RADAU5. Для нахождения конвективных членов в уравнениях применяются численные потоки Русанова и WENO-схема повышенного порядка аппроксимации. На основе полученного алгоритма разработан код с использованием технологии параллельных вычислений MPI. Созданный код использован для расчетов пиролиза этана с радикальными реакциями. Детально изучается формирование сверхравновесных концентраций радикалов по объему реактора. Проведено численное моделирование течения реакционного газа в плоской трубе с подводом лазерного излучения, востребованное для интерпретации экспериментальных результатов. Показано, что лазерное излучение увеличивает в разы конверсию этана и выходы целевых продуктов на коротких длинах ближе к входу в реакционную зону. Сокращение эффективной длины реакционной зоны позволяет предложить новые решения при проектировании реакторов конверсии этана в ценные углеводороды. Разработанный алгоритм и программа найдут свое применение в создании новых технологий лазерной термодинамики.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, уравнения газовой динамики с химическими реакциями, расщепление по физическим процессам, радикально-цепные реакции, лазерное излучение, пиролиз этана

Работа Е. Е. Песковой и В. Н. Снытникова выполнена при поддержке РФФИ (грант № 21-19-00429).

UDC: 519.63

## The computational algorithm for studying internal laminar flows of a multicomponent gas with different-scale chemical processes

E. E. Peskova<sup>1,2,a</sup>, V. N. Snytnikov<sup>1,b</sup>, R. V. Zhalnin<sup>2,c</sup>

<sup>1</sup>Boreskov Institute of Catalysis SB RAS,  
5 Lavrentiev ave., Novosibirsk, 630090, Russia  
<sup>2</sup>National Research Mordovia State University,  
68 Bolshevistskaya st., Saransk, 430005, Russia

E-mail: <sup>a</sup> e.e.peskova@mail.ru, <sup>b</sup> snyt@catalysis.ru, <sup>c</sup> zhrv@mrsu.ru

*Received 04.10.2022, after completion — 15.07.2023.  
Accepted for publication 27.07.2023.*

The article presented the computational algorithm developed to study chemical processes in the internal flows of a multicomponent gas under the influence of laser radiation. The mathematical model is the gas dynamics' equations with chemical reactions at low Mach numbers. It takes into account dissipative terms that describe the dynamics of a viscous heat-conducting medium with diffusion, chemical reactions and energy supply by laser radiation. This mathematical model is characterized by the presence of several very different time and spatial scales. The computational algorithm is based on a splitting scheme by physical processes. Each time integration step is divided into the following blocks: solving the equations of chemical kinetics, solving the equation for the radiation intensity, solving the convection-diffusion equations, calculating the dynamic component of pressure and calculating the correction of the velocity vector. The solution of a stiff system of chemical kinetics equations is carried out using a specialized explicit second-order accuracy scheme or a plug-in RADAU5 module. Numerical Rusanov flows and a WENO scheme of an increased order of approximation are used to find convective terms in the equations. The code based on the obtained algorithm has been developed using MPI parallel computing technology. The developed code is used to calculate the pyrolysis of ethane with radical reactions. The superequilibrium concentrations' formation of radicals in the reactor volume is studied in detail. Numerical simulation of the reaction gas flow in a flat tube with laser radiation supply is carried out, which is in demand for the interpretation of experimental results. It is shown that laser radiation significantly increases the conversion of ethane and yields of target products at short lengths closer to the entrance to the reaction zone. Reducing the effective length of the reaction zone allows us to offer new solutions in the design of ethane conversion reactors into valuable hydrocarbons. The developed algorithm and program will find their application in the creation of new technologies of laser thermochemistry.

**Keywords:** computer simulation, gas dynamics equations with chemical reactions, splitting into physical processes, radical chain reactions, laser radiation, ethane pyrolysis

*Citation:* *Computer Research and Modeling*, 2023, vol. 15, no. 5, pp. 1169–1187 (Russian).

The work of E. E. Peskova and V. N. Snytnikov was supported by the Russian Science Foundation (project No. 21-19-00429).

## Введение

Современные потребности химической индустрии в малотоннажной переработке метана и других легких углеводородов вызвали новый интерес к лазерной термохимии с использованием излучения CO<sub>2</sub>-лазеров для интенсификации процессов газофазного пиролиза [Masyuk et al., 2018]. Математическое моделирование в лазерной термохимии призвано изучить химические процессы с радикальными реакциями углеводородов во внутренних течениях многокомпонентного газа под воздействием лазерного излучения [Карлов, Кириченко, Лукьянчук, 1995]. В математических моделях, помимо радикальных реакций с возможным автокатализом и нелинейных эффектов при поглощении излучения, необходимо учесть нагрев от стенок, теплопроводность и диффузию многочисленных компонентов реакционной среды, а также другие нелинейные по температуре процессы. Локальный нагрев газа при поглощении излучения может привести к возникновению сверхравновесных концентраций радикалов, которые ускорят реакции вне областей своего зарождения. Нелинейные процессы в реакционной среде часто приводят к возникновению пространственных диссипативных структур и диффузионного хаоса [Ахромеева и др., 1992].

Динамика подобных сред описывается системой уравнений газовой динамики с химическими реакциями при малых числах Маха с учетом вязкости, диффузии, теплопроводности (к примеру, [Day, Bell, 2000]) и лазерного излучения. Плотность мощности этого излучения в типичных задачах лазерной термохимии обычно не превышает порога плазмообразования, а локальное выделение энергии от лазерного излучения не приводит к формированию в среде ударных волн [Карлов, Кириченко, Лукьянчук, 1995]. Поскольку указанные процессы характеризуются разномасштабными скоростями протекания, возникает необходимость в использовании специальных математических моделей и численных схем. Они должны обеспечить приемлемое число операций при требуемой точности вычислений. С подобными проблемами в численном моделировании задач лазерной термохимии столкнулись Т. С. Ахромеева, С. П. Курдюмов, Г. Г. Малинецкий, А. А. Самарский и другие исследователи в конце 80-х годов прошлого столетия [Ахромеева и др., 1992; Карлов, Кириченко, Лукьянчук, 1995].

Одна из ключевых проблем при численном решении указанных задач связана с необходимостью выбора шага интегрирования по времени, который при учете химических радикальных реакций определяется самой быстрой стадией из кинетической схемы в области наиболее высоких температур. Требуемый временной шаг для характерного времени этой стадии, как правило, на несколько порядков меньше газодинамического шага, который вычисляется из условий устойчивости явной схемы. Газодинамический шаг зависит от значений шага по пространству, скорости потока, коэффициентов вязкости, диффузии. Отсюда естественным является использование схемы расщепления по физическим процессам, для каждого из которых расчет будет проходить со своим характерным шагом. Разработке эффективных алгоритмов для исследования сверхзвуковых течений реагирующих газов на основе схем расщепления по физическим процессам посвящены работы [Борисов, Критский, Рыков, 2022; Жуков и др., 2020]. В работе [Борисов, Критский, Рыков, 2022] представлена процедура расщепления по типам рассматриваемых процессов: конвекция – диффузия – химические реакции. Основным результатом этой работы является реализация модуля расчета химических реакций и его встраивание в вычислительную модель, в то время как решение диффузионной части системы осуществляется с помощью простой явной схемы. Отличительной особенностью вычислительного алгоритма в статье [Жуков и др., 2020] является использование для решения диффузионной части системы явно-итерационной схемы ЛИ-М, позволяющей производить расчет с временным шагом, ограниченным явной схемой для гиперболической системы. Однако в этом алгоритме отсутствует учет химических превращений и многокомпонентной диффузии, что является важным аспектом в задачах лазерной термохимии. В целом все упомянутые работы ориентированы на моделирование

сверхзвуковых течений, физические и химические особенности которых отличаются от дозвуковых течений. Вычислительные алгоритмы для исследования дозвуковых реагирующих потоков представлены в работах [Day, Bell, 2000; Борисов, Якуш, 2015], которые ориентированы на исследование модельных задач горения. В этих статьях детально не рассматривается взаимное влияние кинетики процесса и многокомпонентной диффузии. Для целей наших исследований эти процессы представляют особый интерес, и в практической эксплуатации программ их учет значительно увеличивает компьютерное время вычислений. Как правило, для задач воздействия лазерного излучения на среду химические реакции во многих работах либо не учитываются, либо учитываются через брутто-реакции без принятия во внимание радикальных механизмов. Это не отвечает потребностям исследования задач лазерной термохимии [Hozoorbakhsh, Ismail, Aziz, 2015].

Целью нашей работы является разработка эффективного вычислительного алгоритма для численного исследования воздействия лазерного излучения на дозвуковой поток газа с радикальными химическими реакциями. Мы предлагаем вычислительный алгоритм повышенного порядка аппроксимации на основе схемы расщепления по физическим процессам для решения задач дозвуковой динамики химически активной многокомпонентной среды под влиянием различных источников энергии. На основе полученного алгоритма разработан код с использованием технологий параллельных вычислений. Проведены расчеты задач, стимулированных экспериментальными исследованиями, по пиролизу этана посредством нагрева стенок реактора и нагрева смеси лазерным излучением.

## Математическая модель и численный алгоритм

Для описания математической модели используем систему уравнений газовой динамики с химическими реакциями при малых числах Маха [Day, Bell, 2000] с учетом диссипативных членов, которая основана на модели горения с малыми числами Маха [Rehm, Baum, 1978] и выведена путем асимптотического анализа в [Majda, Sethian, 1985]:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho Y_m \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_m + R_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \pi + \nabla \cdot \vec{\bar{\tau}}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q} + \alpha \theta. \quad (3)$$

Здесь  $m = 1, \dots, M$ ,  $M$  — количество компонент в газовой смеси,  $\rho$  — плотность смеси,  $Y_m$  — массовая доля  $m$ -й компоненты смеси,  $\vec{v}$  — вектор скорости,  $h$  — энтальпия смеси,  $\vec{J}_m$  — вектор диффузионного потока,  $R_m$  — скорость образования или расхода  $m$ -й компоненты смеси,  $p$  — давление,  $\vec{\bar{\tau}}$  — тензор вязких напряжений,  $\vec{q}$  — вектор потока тепла для смеси,  $\alpha$  — коэффициент поглощения и  $\theta$  — интенсивность излучения, уравнение для которого будет конкретизировано ниже. В уравнении (2) системы (1)–(3) для рассматриваемых задач, в числе которых — лазерная термохимия, изменения в градиенте давления, как правило, значительно меньше изменений в других слагаемых. Поэтому в расчетах вводится  $\pi = p - p_0$  — динамическая составляющая давления,  $p_0 = \text{const}$  — термодинамическая составляющая давления, постоянная в области. Указанные допущения справедливы при  $\frac{|p|}{p_0} \ll 1$ .

Вектор диффузионного потока компонента, вектор потока тепла для смеси, тензор вязких напряжений имеют вид

$$\vec{J}_m = -\rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \quad (4)$$

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T - \sum_m h_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \quad (5)$$

$$\vec{\tau} = \mu (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) I. \quad (6)$$

Здесь  $T$  — температура газовой смеси,  $D_{m,mix}(Y_m, T)$  — средний по смеси коэффициент диффузии  $m$ -й компоненты,  $\lambda(Y_m, T)$  — теплопроводность смеси,  $\mu(Y_m, T)$  — вязкость смеси,  $h_m(T)$  — энтальпия компонента  $m$ .

Система дополняется соотношением между энтальпией, массовыми долями и температурой

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T), \quad (7)$$

$h_m(T)$  — энтальпия компонента  $m$ . Этим уравнением определяется температура смеси.

Для термодинамической составляющей давления  $p_0$  можно записать уравнение состояния газовой смеси:

$$p_0 = \rho RT \sum_m \frac{Y_m}{M_{wm}}, \quad (8)$$

$M_{wm}$  — молекулярная масса  $m$ -й компоненты смеси. Используя это соотношение, уравнение неразрывности в недивергентном виде и уравнение (3), записанное относительно температуры, находится условие на дивергенцию вектора скорости [Day, Bell, 2000] для системы (1)–(3):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{v} = & \frac{1}{\rho C_p T} \left( \nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m + \alpha \theta \right) + \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{M_w}{M_{wm}} (\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \frac{1}{\rho} \sum_m \left( \frac{M_w}{M_{wm}} - \frac{h_m}{C_p T} \right) R_m \equiv S, \quad (9) \end{aligned}$$

где  $C_p(Y_m, T)$  — теплоемкость смеси при постоянном давлении,  $M_w$  — молекулярная масса смеси. Это условие будет применено ниже для расчета динамической составляющей давления  $\pi$  и скорости в уравнении (2).

Заметим, что ненулевое значение дивергенции скорости в уравнении (9) прежде всего связано с химическими реакциями, в которых изменяется объем и, тем самым, плотность среды. В некоторых областях среда может оказаться однокомпонентной. В ней могут отсутствовать излучение и химические реакции, протекающие с изменением объема. Тогда при малых числах Маха движения среды изменением ее плотности можно пренебречь. В этих условиях приведенная система уравнений сводится к хорошо известной системе уравнений несжимаемой жидкости с уравнениями Навье–Стокса (2) для скорости среды. Эта смешанная система является параболической по времени и эллиптической по пространству [Андерсон, Таннехилл, Плетчер, 1990].

Химические превращения в исходной системе уравнений описываются кинетическими схемами химических реакций. Эти кинетические схемы представляют собой, как правило, жесткие системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

Для нахождения интенсивности излучения решается дифференциальное уравнение вида [Snytnikov et al., 2020]

$$\frac{d\theta(l)}{dl} = -\alpha\theta(l); \quad (10)$$

здесь  $\alpha$  — коэффициент поглощения, который является функцией мощности излучения, концентраций поглощающих компонентов смеси и температуры. Координата  $l$  в уравнении отсчитывается вдоль направления распространения лазерного излучения.

Запишем для системы (1)–(3) следующую схему численного интегрирования уравнений по времени. В этой схеме используется расщепление по физическим процессам.

Интегрирование уравнений химической кинетики:

$$\frac{\rho \widetilde{Y}_m - (\rho Y_m)^n}{\Delta t} = (R_m)^n. \quad (11)$$

Интегрирование уравнений неразрывности для каждой компоненты смеси, нахождение плотности на следующем шаге по времени:

$$\frac{(\rho Y_m)^{n+1} - \rho \widetilde{Y}_m}{\Delta t} = -\Lambda_1(\rho Y_m \vec{v})^n - \Lambda_2(\vec{J}_m)^n, \quad (12)$$

$$\rho^{n+1} = \sum_{m=1}^M (\rho Y_m)^{n+1}. \quad (13)$$

Интегрирование уравнения для интенсивности излучения:

$$\frac{\partial \theta^{n+1}}{\partial l} = -\Lambda_3(Y_m^n, T^n, \theta^{n+1}). \quad (14)$$

Интегрирование уравнения для энтальпии смеси:

$$\frac{(\rho h)^{n+1} - (\rho h)^n}{\Delta t} = -\Lambda_4(\rho h \vec{v})^n - \Lambda_5(\vec{q})^n - (\alpha \theta)^{n+1}. \quad (15)$$

Интегрирование уравнения непрерывности:

$$\frac{\vec{v}^* - \vec{v}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^n} \Lambda_6(\rho \vec{v} \vec{v}) - \frac{1}{\rho^n} \Lambda_7(\vec{\tau}), \quad (16)$$

$$\frac{\vec{v}^{n+1} - \vec{v}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1}. \quad (17)$$

Действуя оператором дивергенции на (17), получаем уравнение Пуассона для  $\pi^{n+1}$ :

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1} = \frac{\nabla \cdot \vec{v}^* - \nabla \cdot \vec{v}^{n+1}}{\Delta t} = \frac{\nabla \cdot \vec{v}^* - S^{n+1}}{\Delta t}, \quad (18)$$

$S^{n+1}$  находится из уравнения (9). Таким образом, после нахождения динамической составляющей давления  $\pi^{n+1}$  происходит коррекция скорости с использованием уравнения (17). Подчеркнем, что при реализации численной схемы необходимо выполнение условия  $\frac{|x|}{p_0} \ll 1$ . В этой схеме операторы  $\Lambda_1, \dots, \Lambda_6$  являются пространственными производными в соответствующих уравнениях.

Значительная экономия вычислительных ресурсов может быть получена при отказе от пространственно трехмерной расчетной области. Исходя из цели изучения непосредственно самих физико-химических процессов, далее мы ограничимся постановкой физически содержательных задач в пространственно двумерных областях. Для построения дискретной модели в коде используется равномерная сетка прямоугольников, выбор которой обусловлен такими преимуществами, как простота в реализации численных алгоритмов, отладке программного кода и анализе



полученных результатов:

$$\Omega_{\Delta} = \Omega_{\Delta x} \times \Omega_{\Delta y}, \quad (19)$$

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

$$\Omega_{\Delta y} = \{\Delta_j, j = 1, \dots, N_y, \Delta_j = [y_{j-1}, y_j], |\Delta_j| = y_j - y_{j-1} = h_y, h_y N_y = L_y\},$$

где  $L_{x(y)}$  — размеры расчетной области вдоль осей  $\{x, y\}$ . Все газодинамические параметры и концентрации компонент смеси рассматриваются как интегральные средние в ячейках сетки. Лазерное излучение направим вдоль оси  $x$ . Для выбранной сетки опишем более подробно каждый этап построенного вычислительного алгоритма с уравнениями (11)–(18).

### Интегрирование уравнений химической кинетики

При решении уравнений (1)–(3) учет химических превращений выделяется в отдельный шаг, на котором решается следующая система уравнений:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = R_m, \quad m = 1, \dots, M. \quad (20)$$

Для решения, как правило, жесткой системы уравнений химической кинетики используется специализированная экономичная схема второго порядка точности по времени, предложенная в [Белов, Калиткин, Кузьмина, 2016]. Она основана на специфическом виде жестких задач химической кинетики.

Систему дифференциальных уравнений, описывающую химические превращения в (20), можно записать в следующем виде [Белов, Калиткин, Кузьмина, 2016]:

$$\frac{dc_m}{dt} = -c_m \phi_m(\mathbf{c}) + \psi_m(\mathbf{c}), \quad \mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_M).$$

Здесь  $c_m = \frac{\rho Y_m}{M_{wm}}$ ,  $c_m \geq 0$ ,  $\phi_m(\mathbf{c}) \geq 0$ ,  $\psi_m(\mathbf{c}) \geq 0$ ,  $m = 1, \dots, M$ .

Решение данной системы находится простыми итерациями, при этом необходимо выполнить только две итерации [Белов, Калиткин, Кузьмина, 2016]:

$$\widehat{c}_m^{s+1} = \frac{c_m + \tau \psi_m(\bar{\mathbf{c}}^s) \left(1 + \frac{\tau \phi_m(\bar{\mathbf{c}}^s)}{2}\right)}{1 + \tau \phi_m(\bar{\mathbf{c}}^s) + \frac{(\tau \phi_m(\bar{\mathbf{c}}^s))^2}{2}}, \quad \bar{\mathbf{c}}^s = \frac{\mathbf{c} + \widehat{\mathbf{c}}^s}{2}, \quad \widehat{\mathbf{c}}^0 = \mathbf{c}. \quad (21)$$

Здесь  $c_m$  — решение в исходный момент времени,  $\widehat{c}_m$  — решение в новый момент времени.

В коде предусмотрена возможность использования подключаемого модуля для решения системы (20). Мы используем программу RADAU5, реализующую неявные методы Рунге–Кутты с адаптивным шагом. Она основана на методе Radau IIA пятого порядка, который является  $L$ -устойчивым. Подробное описание алгоритма и код представлены в [Hairer, Wanner, 1996].

При моделировании задач газовых потоков с радикально-цепными реакциями при умеренных температурах смеси (до 1100 К) результаты расчетов с использованием разработанного алгоритма с последовательным включением двух указанных схем совпадают. При увеличении температуры газовой смеси схема (21) сходится при крайне малых шагах интегрирования по времени, что значительно увеличивает общее расчетное время. На рис. 1 представлены графики плотности и массовой доли этилена при температуре 1165 К. Данный факт указывает, что при расчетах радикально-цепных реакций с повышением температуры смеси лазерным излучением необходимо использовать подход, описанный в [Hairer, Wanner, 1996], который показал сходимость результатов при любой температуре.

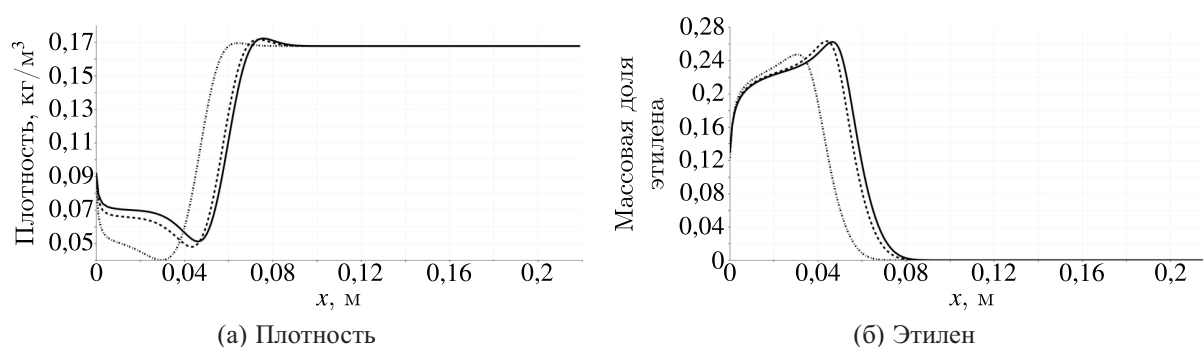


Рис. 1. Распределение плотности и этилена при температуре 1165 К и различных шагах интегрирования уравнений химической кинетики ( $10^{-4}$  — штрихпунктир,  $10^{-5}$  — пунктир,  $10^{-6}$  — сплошная линия) с сохранением шага по газовой динамике ( $10^{-4}$ ), расчет по схеме (21)

### Интегрирование уравнения для интенсивности излучения

Для нахождения интенсивности излучения решается дифференциальное уравнение вида [Snytnikov et al., 2020]

$$\frac{d\theta(x)}{dx} = -\alpha\theta(x); \quad (22)$$

здесь  $\alpha$  — коэффициент поглощения:

$$\alpha = \frac{\alpha_0 Y_{C_2H_4} e^{-E_0/kT}}{1 + \frac{\theta(x)}{I_0}},$$

$\alpha_0$  — сечение вдали от насыщения,  $I_0$  — интенсивность насыщения,  $E_0$  — энергия кванта.

Для решения уравнения (22) применяется схема первого порядка точности по пространству, упомянутая в [Белов, Калиткин, Кузьмина, 2016]. Уравнение (22) можно представить в следующем виде:

$$\frac{d\theta}{dx} = -\theta\phi(\theta) + \psi(\theta), \quad (23)$$

$$\phi(\theta) = \alpha \geq 0, \quad \psi(\theta) = 0.$$

Для решения (23) используется выражение [Белов, Калиткин, Кузьмина, 2016]

$$\theta_{i+1j} = \frac{\theta_{ij} + h_x \psi(\theta_{ij})}{1 + h_x \phi(\theta_{ij})}. \quad (24)$$

Также для решения уравнения (22) возможно применение подключаемого модуля RADAU5.

### Интегрирование газодинамических уравнений

После интегрирования системы уравнений химической кинетики (20) с нахождением  $R_m(Y_m, T)$  и расчета интенсивности излучения  $\theta(x)$  проводится интегрирование газодинамических уравнений с шагом по времени  $\Delta t$ . Схемы, используемые в расчетах конвективных и диффузионных членов, имеют второй порядок аппроксимации по пространству. Система уравнений (1)–(3) представляется в следующем векторном виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial(F^{(1)}(U) - H^{(1)}(U))}{\partial x} + \frac{\partial(F^{(2)}(U) - H^{(2)}(U))}{\partial y} - W = 0. \quad (25)$$



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

$$\begin{aligned}
 U &= \begin{pmatrix} \rho Y_m \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho h \end{pmatrix}, & F^{(1)}(U) &= \begin{pmatrix} \rho u Y_m \\ \rho u^2 \\ \rho uv \\ \rho hu \end{pmatrix}, & F^{(2)}(U) &= \begin{pmatrix} \rho v Y_m \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ \rho hv \end{pmatrix}, \\
 H^{(1)}(U) &= \begin{pmatrix} J_{mx} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ q_x \end{pmatrix}, & H^{(2)}(U) &= \begin{pmatrix} J_{my} \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ q_y \end{pmatrix}, & W &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \alpha\theta \end{pmatrix}, \\
 J_{mx} &= \rho D_{m,mix} \frac{\partial Y_m}{\partial x}, & J_{my} &= \rho D_{m,mix} \frac{\partial Y_m}{\partial y}, \\
 q_x &= \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{m=1}^M h_m \rho D_{m,mix} \frac{\partial Y_m}{\partial x}, & q_y &= \lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{m=1}^M h_m \rho D_{m,mix} \frac{\partial Y_m}{\partial y}, \\
 \tau_{xx} &= \mu \left( 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right), & \tau_{yy} &= \mu \left( 2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right), \\
 \tau_{xy} &= \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right).
 \end{aligned}$$

Здесь  $m = 1, 2, \dots, M$ ,  $M$  — количество компонент в газовой смеси,  $D_{m,mix}$  — средний по смеси коэффициент диффузии  $m$ -й компоненты,  $\lambda$  — теплопроводность смеси,  $h_m$  — энтальпии  $m$ -й компоненты газовой смеси,  $T$  — температура,  $\mu$  — коэффициент динамической вязкости смеси.

Для численного решения системы (25) используется разностная схема вида

$$\begin{aligned}
 \frac{U_{ij}^{n+1} - U_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{F}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{F}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} - \\
 - \left( \frac{\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{H}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{H}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} \right) - W_{ij} = 0. \quad (26)
 \end{aligned}$$

Здесь  $U_{ij}^{n+1} = (\rho_{ij}^{n+1} Y_{m,i,j}^{n+1}, \rho_{ij}^{n+1} u_{ij}^*, \rho_{ij}^{n+1} v_{ij}^*, \rho_{ij}^{n+1} h_{ij}^{n+1})^T$  — искомый вектор,  $\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} = \tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^r, U_{i+1/2j}^l)$ ,  $\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} = \tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^r, U_{ij+1/2}^l)$  — конвективные потоки, для расчета которых применяется поток Русанова [Русанов, 1961]:

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} &= 0,5 (\tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^r) + \tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^l) - \alpha_1 (U_{i+1/2j}^r - U_{i+1/2j}^l)), \\
 \tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} &= 0,5 (\tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^r) + \tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^l) - \alpha_2 (U_{ij+1/2}^r - U_{ij+1/2}^l)), \\
 \alpha_1 &= \max \left( \sqrt{(u_{i+1/2j}^r)^2 + (v_{i+1/2j}^r)^2}, \sqrt{(u_{i+1/2j}^l)^2 + (v_{i+1/2j}^l)^2} \right), \\
 \alpha_2 &= \max \left( \sqrt{(u_{ij+1/2}^r)^2 + (v_{ij+1/2}^r)^2}, \sqrt{(u_{ij+1/2}^l)^2 + (v_{ij+1/2}^l)^2} \right),
 \end{aligned}$$

где  $U_{i+1/2j}^r$ ,  $U_{i+1/2j}^l$  — значения вектора переменных  $U$  слева и справа от границы между  $i$ -й и  $(i + 1)$ -й ячейками, для расчета которых применяется WENO-схема пятого порядка точности [Shu, 1997].

Дискретные потоки на границах между ячейками  $\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)}$ ,  $\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)}$ , отвечающие за перенос тепла и диффузионный перенос, определяются по схеме с центральными разностями.

### Коррекция скорости и расчет динамической составляющей давления

С использованием разностной схемы (26) рассчитаны значения плотности, энтальпии, концентрации компонент газовой смеси на шаге по времени  $n + 1$ , а также предиктор вектора скорости  $\vec{v}^*$ . Вычисленное таким образом поле скорости  $\vec{v}^*$  не учитывает вклад динамической составляющей давления  $\pi^{n+1}$ . По методу расщепления  $\vec{v}^*$  корректируется следующим образом:

$$\vec{v}^{n+1} = \vec{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1}. \quad (27)$$

Для определения  $\pi^{n+1}$  решаем уравнение Пуассона (18):

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \vec{v}^* - S^{n+1}). \quad (28)$$

Величина  $S^{n+1}$  рассчитывается из уравнения (9) со значениями функций, найденных на газодинамическом шаге  $n + 1$  по времени.

На выбранной сетке (19) уравнение (28) аппроксимируется следующим образом:

$$\frac{\pi_{i+1j} - 2\pi_{ij} + \pi_{i-1j}}{h_x^2} + \frac{\pi_{ij+1} - 2\pi_{ij} + \pi_{ij-1}}{h_y^2} = G_{ij}, \quad (29)$$

$$i = 1, \dots, N_x, \quad j = 1, \dots, N_y,$$

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

В этой разностной схеме принята схема «крест», которая дает второй порядок аппроксимации по каждому направлению.

Разностная система уравнений дополнена граничными условиями во внешних ячейках:

$$\pi_{0j} = p_{0j} - p_0, \quad \pi_{N_x+1j} = 0, \quad \pi_{i0} = \pi_{i1}, \quad \pi_{iN_y+1} = \pi_{iN_y}, \quad (30)$$

$$j = 1, \dots, N_y, \quad i = 1, \dots, N_x.$$

$p_{0j}$  — давление на входе, задается по начальным условиям задачи. В частном случае для задачи Пуазейля оно рассчитывается из расхода реакционной смеси.

Полученная система линейных алгебраических уравнений решается итерационным методом Якоби. Он весьма экономичен для случая задачи, поскольку в качестве начального приближения для итераций берется значение с предыдущего временного шага.

### Граничные и начальные условия

В настоящей работе решаются задачи дозвукового течения газа с граничными условиями следующих видов.

- Вход. Во входном сечении, через которое втекает дозвуковой газовой поток, задаются состав  $Y_m$ , температура  $T_{in}$ , объемный расход газовой смеси  $Q$  или давление  $p_{in}$ , а также углы входа потока ( $\alpha_x, \alpha_y$ ).

Давление газовой смеси на входе и выходе плоской трубы рассчитывается согласно уравнению Пуазейля:

$$p_{in} = p_{out} + \frac{12QL_x\mu}{S_{in}L_y^2}, \quad (31)$$

где  $S_{in}$  — площадь входного сечения.

- Выход. Задается давление  $p_{out}$ .
- Стенка. Условие прилипания. На стенке ставится условие прилипания потока:

$$\vec{v} = w(t). \quad (32)$$

Здесь  $w(t)$  — скорость движения границы. В частности, для неподвижной стенки:

$$u = v = 0. \quad (33)$$

Температура на стенке задана во внешней ячейке  $T = T_{bound}$ . Для вектора переменных  $U^* = (\rho Y_m, \rho h)^T$  на стенке задано граничное условие:

$$\frac{\partial U^*}{\partial n} = 0, \quad (34)$$

где  $\mathbf{n}$  — внешняя нормаль к границе.

Указанные граничные условия не исчерпывают возможность других постановок для реализованного вычислительного алгоритма.

## Реализация параллельного вычислительного алгоритма

Параллельный вычислительный алгоритм построен на основе технологии для систем с распределенной памятью MPI (Message Passing Interface). Реализация механизмов межпроцессорного обмена и работы программного комплекса осуществлялась с помощью библиотеки MPICH.

В основу параллельного алгоритма заложена геометрическая декомпозиция расчетной области. Расчетная область разбивается на подобласти по числу используемых процессоров. На отдельном процессоре решается задача в подобласти с определенными для нее начальными и граничными условиями. Для организации процедуры межпроцессорного обмена в каждой области вводятся слои фиктивных ячеек на границе. Если область является приграничной, то значения в фиктивных ячейках заполняются согласно граничным условиям, остальные фиктивные ячейки заполняются данными, полученными после вызова процедуры межпроцессорного обмена. С учетом построенной разностной схемы явного типа для газодинамического дробного шага, на каждом процессоре необходимо знать значения концентраций и газодинамических параметров в своем наборе граничных ячеек. Это приводит к необходимости межпроцессорного обмена полученными данными после каждого шага расчета газодинамических параметров. После расчета динамической составляющей давления и коррекции вектора скорости происходит обмен полученными значениями  $\pi$  и  $\vec{v}$ . Расчет динамической составляющей давления так же происходит в параллельном режиме: на каждой итерации происходит обмен в фиктивных ячейках, являющихся граничными для каждой подобласти. Программную реализацию алгоритма на одном вычислительном узле можно представить следующим образом.

1. Инициализация начальных данных.
2. Межпроцессорный обмен данными основной сетки.
3. Расчет граничных условий для каждого ядра процессоров.
4. Решение уравнений химической кинетики согласно системе (20).
5. Решение уравнения для интенсивности излучения (22).

6. Параллельное вычисление на ядрах процессоров конвективных, диффузионных и тепловых потоков с использованием концентраций компонент и газодинамических параметров на предыдущем шаге по времени.
7. Параллельное вычисление на ядрах процессоров значений плотности, энтальпии, скорости и концентраций компонент газовой смеси на текущем шаге по времени согласно системе (26).
8. Межпроцессорный обмен данными плотности, концентраций, интенсивности, энтальпии и предварительного вектора скорости.
9. Расчет граничных условий для каждого ядра процессоров.
10. Параллельный расчет динамической составляющей давления и коррекция вектора скорости согласно уравнениям (27), (28).
11. Межпроцессорный обмен полученными значениями динамической составляющей давления и вектора скорости.
12. Вывод промежуточных результатов расчета.
13. Увеличение «счетчика» времени.
14. Если не достигнуто заданное время расчета, переход к п. 3.
15. Завершение работы программы.

Для пересылки и получения данных между процессорами в программном коде применяются парные блокирующие функции  $MPI\_Send()$ ,  $MPI\_Recv()$ . Их выбор обусловлен наличием в параллельном алгоритме обменов только между двумя процессорами. При реализации параллельного расчета уравнения Пуассона используется функция  $MPI\_Allreduce()$ .

Для вывода результатов каждым процессором используются XML-форматы (VTS, PVTS). Визуализация данных расчетов осуществляется в программе ParaView. Все расчеты для задач, описанных в следующем разделе, проводились на рабочей станции Intel Xeon CPU E5-2698 v4 2,20 GHz x 40 ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва».

Представленный вычислительный алгоритм ранее был протестирован при решении задач динамики многокомпонентного газа с малыми числами Маха и химическими реакциями без учета лазерного излучения. Для процессов пиролиза этана и пропана в лабораторных реакторах получено хорошее соответствие экспериментальных и расчетных зависимостей [Жалнин и др., 2017; Gubaydullin et al., 2021].

## Течение газа в плоской трубе

В этом разделе на модельном примере термического разложения этана мы демонстрируем работу созданного ядра программы, которая предназначена для проведения вычислительных экспериментов по изучению динамики химически активной многокомпонентной среды. Кинетическая схема взятых радикально цепных реакций представлена в таблице 1. В ней учтены три радикала  $H^\bullet$ ,  $CH_3^\bullet$ ,  $C_2H_5^\bullet$  с сильно отличающимися массами, три продукта  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_4$  и пять реакций. В этой схеме отражены основные особенности и трудности, с которыми сталкиваются исследователи при проведении расчетов. Это жесткая система ОДУ, отличие равновесных концентраций радикалов на порядки своих величин, сильное изменение плотности среды, изменение скорости потока при химических реакциях, возможность протекания первой из реакций на

стенках, значительная теплопередача и энергопоглощение. С другой стороны, схема достаточно компактна, что позволяет легко увидеть отклик на изменение параметров и взаимосвязи в изучаемом реакторе. Необходимо подчеркнуть, что схема предназначена для иллюстрации работы вычислительного алгоритма и всей параллельной программы. Приведенная кинетическая схема не претендует на полноту химического механизма пиролиза этана в отличие от 15-стадийной схемы [Nurislamova et al., 2014]. Вычисления проведены нами для плоской трубы длиной 220 мм и шириной 21 мм. Далее мы приводим результаты расчета, в котором была задана температура стенок 915,15 К. Давление на выходе из правого конца трубы — 101 325 Па. В начальный момент времени считается, что труба заполнена метаном с температурой стенок 915,15 К. Исходная смесь, состоящая из этана и метана (40 %  $C_2H_6$ , 60 %  $CH_4$ ), входит через левый конец трубы с расходом 40 л/ч. Входная температура смеси равна 870,15 К. Давление на входе газовой смеси рассчитывалось по расходу согласно уравнению Пуазейля.

Таблица 1. Схема реакции и кинетические параметры

Стадия	$\lg A_i$ , 1/с или л/(моль · с)	$E_i$ , кДж/моль
$C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + CH_3^\bullet$	15,0	360,0
$CH_3^\bullet + C_2H_6 \rightarrow CH_4 + C_2H_5^\bullet$	10,0	50,0
$C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + H^\bullet$	13,5	170,0
$H^\bullet + C_2H_6 \rightarrow H_2 + C_2H_5^\bullet$	9,65	40,0
$C_2H_5^\bullet + C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + C_2H_6$	10,0	8,4

На рис. 2 представлены распределения по трубе скорости газовой смеси. Профиль скорости смеси теряет свое начальное распределение примерно на половине калибра трубы. Около стенок формируется пограничный слой, в котором на начальном участке особенно интенсивно идет химический процесс с формированием радикалов. Далее газовый поток ускоряется с увеличением скорости примерно в два раза.

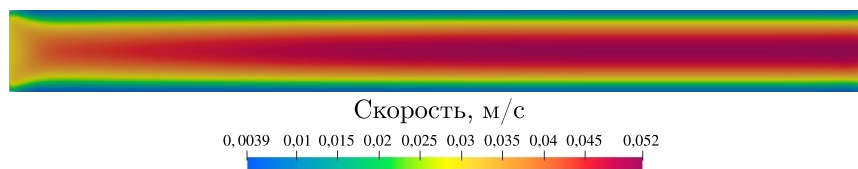


Рис. 2. Распределение скорости по трубе

На рис. 3 представлено распределение по трубе температуры газовой смеси при установившемся течении. Как следует из распределений рис. 2 и 3, течение в трубе реагирующего газа можно разделить на две примерно равных половины. В левой из них поглощается тепло и идут химические реакции, а в правой происходит релаксация полученной смеси газов к равновесным параметрам с выравниванием температуры газа и стенки.

На рис. 4 представлено распределение по трубе массовой доли этильного радикала  $C_2H_5^\bullet$  при установившемся течении. На рис. 5 приведено поперечное распределение радикалов  $H^\bullet$ ,  $CH_3^\bullet$ ,  $C_2H_5^\bullet$  на расстоянии 50 мм от входа. На рис. 6 представлено распределение по трубе массовой доли этилена, а на рис. 7 приведено продольное распределение исходного  $C_2H_6$  и продуктов  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_4$  по центру плоской трубы.

Как следует из распределений рис. 4, 6, интенсивный синтез этилена начинается с расстояний около одного калибра от входа и заканчивается к середине трубы. Распределение этилена в реакционной зоне отвечает распределению температуры с его большим количеством около стенок. Прогреву газа препятствует эндотермическая реакция, которая оставляет характерную

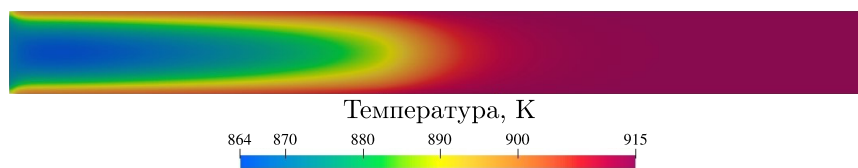


Рис. 3. Распределение температуры по трубе

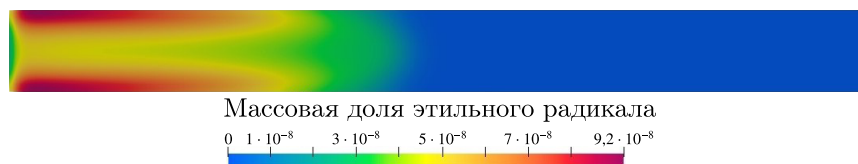
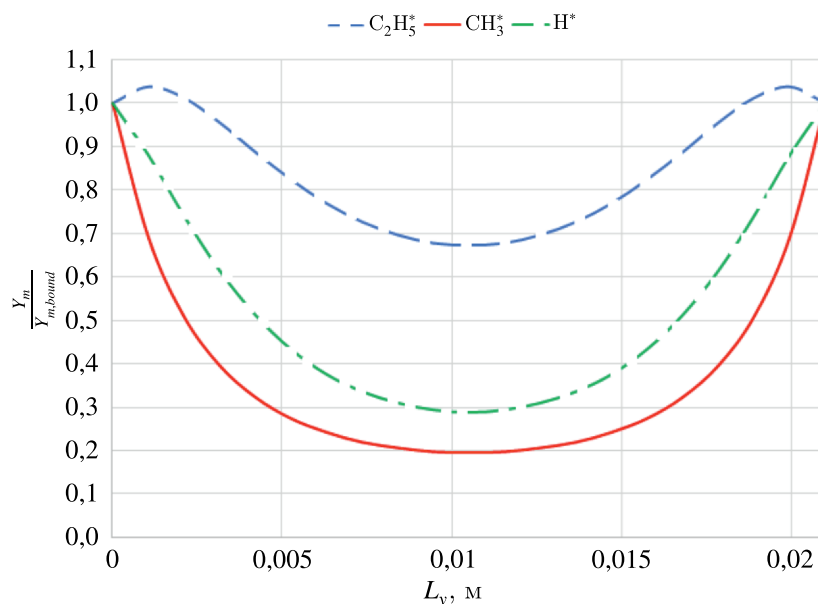
Рис. 4. Распределение массовой доли этильного радикала ( $C_2H_5^*$ ) по трубе

Рис. 5. Распределение массовых долей радикалов  $C_2H_5^*$  (штрих),  $CH_3^*$  (сплошная линия),  $H^*$  (штрихпунктир), нормированных относительно значений массовых долей в граничной ячейке, в поперечном сечении трубы. Нормировки для каждого из радикалов:  $Y_{C_2H_5^*,bound} = 6,3 \cdot 10^{-8}$ ,  $Y_{CH_3^*,bound} = 1,59 \cdot 10^{-11}$ ,  $Y_{H^*,bound} = 4,52 \cdot 10^{-10}$

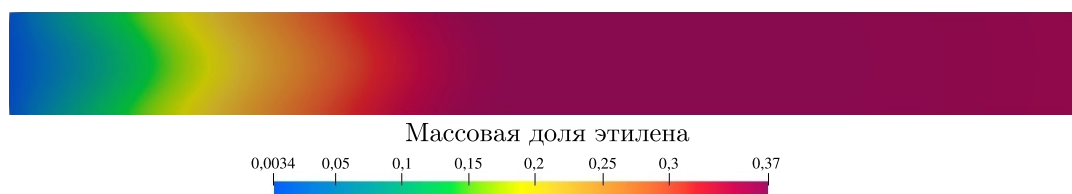


Рис. 6. Распределение массовой доли этилена по трубе

зону пониженной температуры в центре реактора до ее исчезновения по мере истощения этана. Диффузия этилена, связанная с диффузией водорода, выравняет распределение этилена по реактору. Зона протекания пиролиза выявляется по распределению этильного радикала  $C_2H_5^*$ , который сосредоточен вблизи горячих стенок трубы и истощается по мере падения содержа-



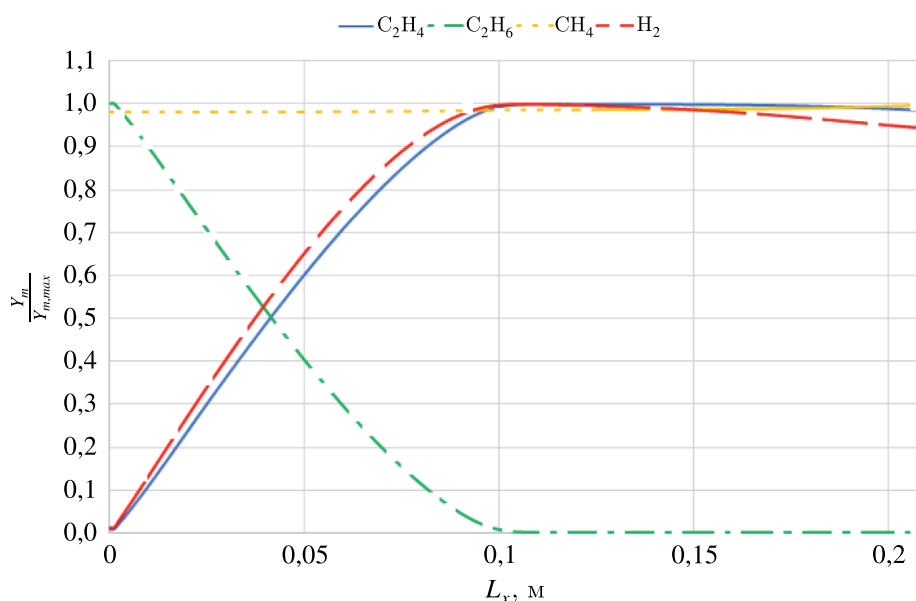


Рис. 7. Распределение массовых долей этана (штрихпунктир), этилена (сплошная линия), водорода (пунктир), метана (точка), нормированных относительно их максимальных значений, в продольном сечении трубы. Нормировки для каждой из долей:  $Y_{C_2H_4, \max} = 0,3737$ ,  $Y_{C_2H_6, \max} = 0,3964$ ,  $Y_{CH_4, \max} = 0,6112$ ,  $Y_{H_2, \max} = 0,0232$

ния этана. На поперечном распределении радикалов на расстоянии 50 мм от входа в трубу на рис. 5 видно сложное взаимодействие радикальных цепных реакций и диффузии радикалов, связанных с теплопроводностью газа и энергопоглощением в реакциях. Каждый из трех радикалов характеризуется своим наклоном распределения, от которых зависит химический синтез этилена. Химический процесс зависит от трех эффективных масштабов. Один из масштабов, связанный с радикалом  $CH_3^\bullet$ , определяет узкую зону зарождения процесса. Второй из масштабов, связанный с легко диффундирующим  $H^\bullet$ , дает зону поддержания радикального цепного цикла синтеза этильного радикала. Третий масштаб, связанный с  $C_2H_5^\bullet$ , дает зону синтеза этилена. Наличие этих трех масштабов показывает сложность создания аналитических моделей радикальных цепных процессов как синтезов продуктов пиролиза с поглощением энергии от стенок реактора. В то же время продольные распределения массовых долей целевых продуктов синтеза, приведенных на рис. 7, показывают достаточно простые зависимости нарастания продуктов синтеза вдоль трубы, включая слабое изменение массовой доли метана и преобладание водорода с этиленом в продуктах.

Для таких зависимостей вполне подходит полуэмпирическое описание выхода продуктов, что обычно и используется в упрощенных расчетах химических реакторов пиролиза. Возможность такого полуэмпирического описания дает количественное сопоставление расчетных и аналитических зависимостей газодинамических величин, характеризующих течение реакционной многокомпонентной среды.

## Течение газа в плоской трубе с подводом лазерного излучения

В данном разделе приведены результаты моделирования реагирующих потоков с учетом лазерного излучения. Кинетическая схема пиролиза этана представлена в таблице 2 [Nurislamova et al., 2014].

Таблица 2. Схема реакции и кинетические параметры

Стадия	$\lg A_i$ , 1/с или л/(моль · с)	$E_i$ , кДж/моль
$C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + CH_3^\bullet$	16,0	360,0
$CH_3^\bullet + C_2H_6 \rightarrow CH_4 + C_2H_5^\bullet$	10,0	50,0
$C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + H^\bullet$	13,5	170,0
$H^\bullet + C_2H_6 \rightarrow H_2 + C_2H_5^\bullet$	9,65	40,0
$H^\bullet + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5^\bullet$	10,4	8,4
$CH_3^\bullet + C_2H_4 \rightarrow n-C_3H_7^\bullet$	10,9	33,0
$n-C_3H_7^\bullet \rightarrow CH_3^\bullet + C_2H_4$	13,9	137,0
$C_2H_5^\bullet + C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + C_2H_6$	10,0	8,4
$n-C_3H_7^\bullet + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5^\bullet + C_3H_6$	7,4	27,6
$CH_3^\bullet + C_2H_4 \rightarrow CH_4 + C_2H_3^\bullet$	8,6	35,0
$CH_3^\bullet + C_2H_3^\bullet \rightarrow CH_4 + C_2H_2$	9,95	3,2
$C_2H_3^\bullet + H^\bullet \rightarrow C_2H_2 + H_2$	10,0	0,0
$C_2H_4 \rightarrow \bullet C_2H_4$	14,5	253,0
$\bullet C_2H_4 + C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + n-C_3H_7^\bullet$	14,0	216,0
$\bullet C_2H_4 \rightarrow C_2H_4$	5,38	0,0

Вычислительные эксперименты проведены для плоской трубы длиной 220 мм и шириной 21 мм. Условие на шаг интегрирования по времени определяется из условия устойчивости явной схемы для параболической системы уравнений, поскольку в решаемых нами задачах доминируют диффузионные процессы:  $\frac{\Delta t}{h_x^2} \leq \frac{1}{4D_{m,mix}}$ . В рассматриваемых задачах максимальное значение  $D_{m,mix} \approx 0,02$ . Проверка сходимости проводилась на последовательности сгущающихся сеток ( $h_x = h_y = 2 \cdot 10^{-3}$ ,  $h_x = h_y = 1 \cdot 10^{-3}$ ,  $h_x = h_y = 0,5 \cdot 10^{-3}$ ) при сохранении условия  $\frac{\Delta t}{h_x^2} = 10$ . В работе представлены результаты расчетов на равномерной сетке с шагом  $h_x = h_y = 10^{-3}$ . Время расчетов на кластере с 11 вычислительными узлами составляло 6 часов.

На рисунках приведены результаты расчета, в котором была задана температура стенок 915,15 К, интенсивность лазерного излучения, подаваемого через вход трубы слева, —  $2,04 \cdot 10^5$  Вт/м<sup>2</sup>, ширина пучка — 5 мм. Давление на выходе трубы справа — 101 325 Па. В начальный момент времени считается, что труба заполнена метаном с температурой стенок 915,15 К. Через левый вход трубы поступает метан, на расстоянии 42 мм от этого входа сверху и снизу поступает смесь этана и метана (50 % C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, 50 % CH<sub>4</sub>). В результате излучение на входе свободно проходит через слой непоглощающего метана. В итоге исходная смесь, состоящая из этана и метана, поступает в трубу с расходом 40 л/ч. Температура втекающей смеси газов равна 870,15 К.

Для сравнения результатов были проведены расчеты в отсутствие лазерного излучения, графики которых на рис. 8–12 приводятся далее на левых панелях. На рис. 8 приведено распределение интенсивности излучения по длине реактора. Из него следует, что в начальной зоне с отсутствием этилена излучение свободно проходит через среду и начинает поглощаться в зоне ввода этана. Излучение полностью поглощается примерно на половине длины реактора, ускоряя газ и нагревая его в зоне ввода этана и навстречу излучению (рис. 9, 10). В результате область превращения этана (рис. 11) сосредотачивается в присутствии излучения местом его ввода в реактор. В то же время водород (рис. 12) как легкий продукт реакции диффундирует навстречу потоку и занимает больший объем реактора. Повышение температуры газовой смеси в области поглощения на 400 К (рис. 10) приводит к значительному увеличению выхода целевых продуктов в этой области (рис. 12). Таким образом, подвод энергии в реагирующую смесь посредством лазерного излучения способствует интенсификации химических процессов в реакторах и дает

возможность получения водорода и ценных углеводородов на меньших длинах реакторов пиролиза.

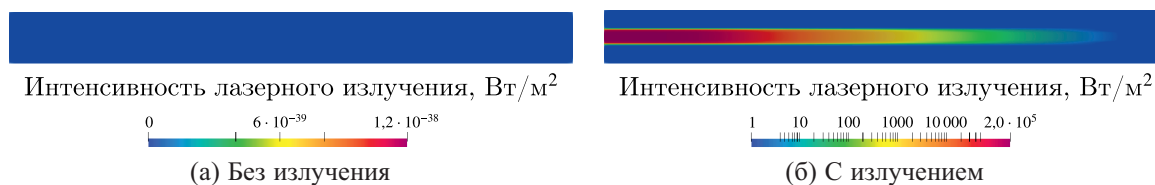


Рис. 8. Распределение интенсивности по трубе

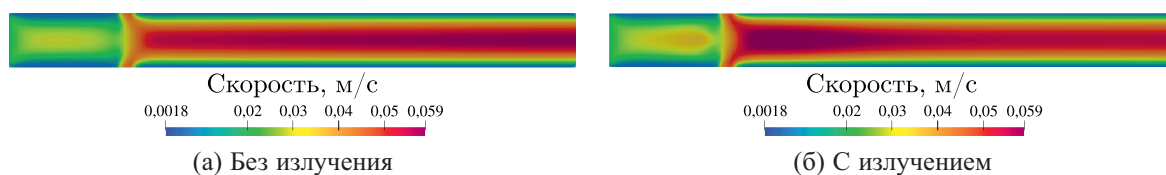


Рис. 9. Распределение скорости по трубе



Рис. 10. Распределение температуры по трубе



Рис. 11. Распределение этана по трубе

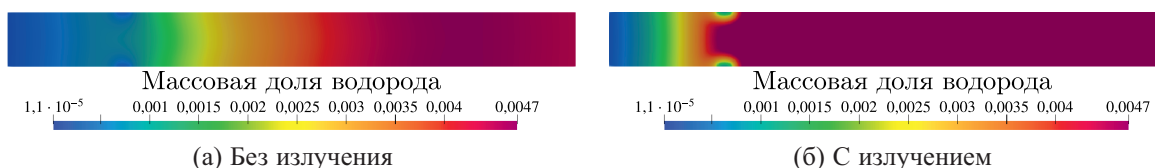


Рис. 12. Распределение водорода по трубе

## Выводы

Создан вычислительный алгоритм для решения научных задач, возникающих в исследованиях быстрых химических процессов во внутренних ламинарных потоках многокомпонентного газа с источниками энергии. Для этих задач характерно наличие нескольких сильно различающихся между собой временных и пространственных масштабов, которые содержатся в математической модели на основе уравнений газовой динамики с химическими реакциями при малых

числах Маха с учетом диссипативных членов. Алгоритм построен на основе метода расщепления по физическим процессам на равномерной прямоугольной сетке в двумерной области. Разработанный на основе алгоритма параллельный код позволяет рассчитывать радикальные цепные реакции в сложных кинетических схемах и детально исследовать поведение радикалов по всему объему реактора, их влияние на протекание химического процесса. Проведены расчеты задач, близких к экспериментальным, по пиролизу этана под воздействием лазерного излучения. Показано, что подвод энергии в реагирующую среду посредством лазерного излучения позволяет интенсифицировать химические процессы с высоким выходом целевых продуктов. В дальнейшем планируются расширение алгоритма на расчет течения многофазной среды «газ – пылевая твердая фаза» с химическими реакциями на ее поверхности и адаптация его на расчет на трехмерных неструктурированных сетках.

## Список литературы (References)

- Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен / пер. с англ. — М.: Мир, 1990. — 392 с.  
*Anderson D., Tannehill J., Pletcher R.* Computational fluid mechanics and heat transfer. — Hemisphere, 1984. — 599 p. (Russ. ed.: *Anderson D., Tannehill J., Pletcher R.* Vychislitel'naya gidromekhanika i teploobmen / per. s angl. — Moscow: Mir, 1990. — 392 p.)
- Ахромеева Т. С., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г., Самарский А. А. Нестационарные структуры и диффузионный хаос. — М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит., 1992. — 544 с.  
*Akhromeeva T. S., Kurdyumov S. P., Malinetskiy G. G., Samarskiy A. A.* Nestatsionarnye struktury i diffuzionnyi kaos [Structures and Diffusion Chaos]. — Moscow: Nauka, gl. red. phys.-math. lit., 1992. — 544 p. (in Russian).
- Белов А. А., Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Моделирование химической кинетики в газах // Математическое моделирование. — 2016. — Т. 28, № 8. — С. 46–64.  
*Belov A. A., Kalitkin N. N., Kuzmina L. V.* Modelirovanie khimicheskoi kinetiki v gazakh [Chemical kinetics simulation in gases] // Matematicheskoye modelirovaniye [Mathematical Models and Computer Simulations]. — 2016. — Vol. 28, No. 8. — P. 46–64 (in Russian).
- Борисов В. Е., Критский Б. В., Рыков Ю. Г. Программный модуль MCFL-Chem для расчета высокоскоростных течений смеси реагирующих газов // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2022. — № 21. — 40 с.  
*Borisov V. E., Kritsky B. V., Rykov Yu. G.* Programmnyi modul' MCFL-Chem dlya rascheta vysokoskorostnykh techenii smesi reagiruyushchikh gazov [MCFL-Chem software module for numerical simulation of high-speed reacting flows] // Preprinty IPM im. M. V. Keldysha. — 2022. — No. 21. — 40 p. (in Russian).
- Борисов В. Е., Якуш С. Е. Применение адаптивных иерархических сеток для расчета течений реагирующих газов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. — 2015. — Т. 16, № 2. — 20 с.  
*Borisov V. E., Yakush S. E.* Primenenie adaptivnykh ierarkhicheskikh setok dlya rascheta techenii reagiruyushchikh gazov [Application of adaptive hierarchical grids to simulation of reacting gas flows] // Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics. — 2015. — Vol. 16, No. 2. — 20 p. (in Russian).
- Жалнин Р. В., Пескова Е. Е., Стадниченко О. А., Тишкин В. Ф. Моделирование течения многокомпонентного реагирующего газа с использованием алгоритмов высокого порядка точности // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. — 2017. — Т. 27, № 1. — С. 608–617.  
*Zhalnin R. V., Peskova E. E., Stadnichenko O. A., Tishkin V. F.* Modelirovanie techeniya mnogokomponentnogo reagiruyushchego gaza s ispol'zovaniem algoritmov vysokogo poriyadka tochnosti [Modeling the flow of a multicomponent reactive gas using high accuracy algorithms] // Vestnik Udmurtskogo universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye nauki. — 2017. — Vol. 27, No. 1. — P. 608–617 (in Russian).
- Жуков В. Т., Феодоритова О. Б., Новикова Н. Д., Дубень А. П. Явно-итерационная схема для интегрирования по времени системы уравнений Навье–Стокса // Математическое моделирование. — 2020. — Т. 32, № 4. — С. 57–74.  
*Zhukov V. T., Feodoritova O. B., Novikova N. D., Duben A. P.* Yavno-iteratsionnaya skhema dlya integrirvaniya po vremeni sistemy uravnenii Nav'e–Stoksa [Explicit-iterative scheme for the time integration of a system of Navier–Stokes equations] // Matematicheskoye modelirovaniye [Mathematical Models and Computer Simulations]. — 2020. — Vol. 32, No. 4. — P. 57–74 (in Russian).

- Карлов Н. В., Кириченко Н. А., Лукьянчук Б. С.* Лазерная термохимия. — М., 1995. — 368 с.  
*Karlov N. V., Kirichenko N. A., Luk'yanchuk B. S.* Lazernaya termokhimiya [Laser thermochemistry]. — Moscow, 1995. — 368 p. (in Russian).
- Русанов В. В.* Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1961. — Т. 1, № 2. — С. 267–279.  
*Rusanov V. V.* Raschet vzaimodeistviya nestatsionarnykh udarnykh voln s prepyatstviyami [The calculation of the interaction of non-stationary shock waves and obstacles] // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1962. — Vol. 1, No. 2. — P. 304–320 (in Russian).
- Day M. S., Bell J. B.* Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling. — 2000. — Vol. 4, No. 4. — P. 535–556.
- Gubaydullin I. M., Zhalnin R. V., Masyagin V. F., Peskova E. E., Tishkin V. F.* Simulation of propane pyrolysis in a flow-through chemical reactor under constant external heating // Mathematical models and computer simulations. — 2021. — Vol. 13, No. 3. — P. 437–444.
- Hairer E., Wanner G.* Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential-algebraic problems. — Berlin: Springer-Verlag, 1996.
- Hozoorbakhsh A., Ismail M. I. S., Aziz N. B. A.* A computational analysis of heat transfer and fluid flow in high-speed scanning of laser micro-welding // International Communications in Heat and Mass Transfer. — 2015. — Vol. 68. — P. 178–187.
- Majda A., Sethian J.* The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion // Combust. Sci. Tech. — 1985. — Vol. 42. — P. 185–205.
- Masyuk N., Sherin A., Snytnikov V. N., Snytnikov V. N.* Effect of infrared laser radiation on gas-phase pyrolysis of ethane // Journal of Analytical and Applied Pyrolysis. — 2018. — Vol. 134. — P. 122–129.
- 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. — P. 143–154.
- Rehm R. G., Baum H. R.* The equation of motion for thermally driven, buoyant flows // J. Research NBS. — 1978. — Vol. 83, Iss. 3. — P. 297–308.
- Shu C. W.* Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // ICASE Report. — 1997. — No. 97-65. — P. 79.
- Snytnikov V. N., Snytnikov V. N., Masyuk N. S., Markelova T. V.* The absorption of CO<sub>2</sub> laser radiation by ethylene in mixtures with methane // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. — 2020. — Vol. 253, No. 107119. — P. 1–6.