

К. А. Терещенко, Н. В. Улитин, Р. Р. Набиев

РАСЧЕТ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ И ТЕМПЕРАТУРНЫХ УСЛОВИЙ В РЕАКТОРЕ СИНТЕЗА БУТИЛКАУЧУКА С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

Ключевые слова: бутилкаучук, быстрые жидкофазные процессы, вычислительная гидродинамика, система уравнений Навье-Стокса, сополимеризация.

Предложен алгоритм расчета гидродинамических и температурных условий в реакторе синтеза бутилкаучука, базирующийся на стандартных методах вычислительной гидродинамики: проведена дискретизация уравнений, построена смешанная дискретная схема решения полученной системы линейных уравнений методом установления по координате времени и методом прогонки по геометрическим координатам.

Keywords: butyl rubber, fast liquid-phase processes, computational hydrodynamics, Navier - Stokes equation system, copolymerization.

A computational algorithm of hydrodynamics and thermal conditions in the butyl rubber synthesis reactor which is based on standard methods of computational hydrodynamics was offered: equation digitalization was carried out; a combined discrete scheme concept of the obtained system was made by the method of setting on time coordinate and geometric coordinates sweep method.

Введение

Бутилкаучук (БК) получают путем катионной сополимеризации изобутилена с изопреном, протекающей с высокой скоростью и большим выделением тепла [1-7]. Избыток тепла в зоне реакции приводит к ухудшению механических свойств и налипанию образующегося БК на стенки реактора. При этом существенное влияние на процесс начинает оказывать геометрия аппарата. Она должна способствовать формированию поля скоростей, облегчающего диспергирование вводимой каталитической смеси и улучшающего теплообмен. Поэтому актуальной является задача математического моделирования процесса получения БК в целях определения оптимальной (с точки зрения свойств продукта) геометрии аппарата и других влияющих факторов. Однако моделирование в стандартных программных пакетах вычислительной гидродинамики настоящей задачи затруднительно, так как они не учитывают специфику химических превращений при сополимеризации, сопровождающейся выделением тепла.

В связи с вышесказанным целью настоящей работы стало создание алгоритма расчета гидродинамических и температурных условий в реакторе синтеза бутилкаучука (то есть для течения жидкости, осложненного протеканием химической реакции) с применением стандартных методов вычислительной гидродинамики на основе системы уравнений Навье-Стокса и системы уравнений химической кинетики, описывающей расход реагирующих веществ.

Алгоритм расчета и обсуждение результатов

Исходная система уравнений имеет следующий вид [8-10]. Уравнение неразрывности всей реакционной массы:

$$\frac{\partial v_i}{\partial \zeta^i} = 0.$$

Уравнения неразрывности по каждой компоненте реакционной массы:

$$\frac{d\rho \bar{Y}_i}{dt} + \frac{d(\rho \bar{v}_j \bar{Y}_i)}{d\zeta_j} = \left(\rho D_i + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial^2 \bar{Y}_i}{\partial \zeta_j^2} + S_i.$$

Уравнения сохранения импульса для сплошной среды в проекциях на оси координат:

$$\rho \frac{\partial v^k}{\partial t} + \rho v^i \nabla_i v^k = \rho F^k + \nabla_i p^{ki}, \quad k = 1, 2, 3.$$

Уравнение сохранения энергии для сплошной среды

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho v^i \nabla_i h = \frac{dp}{dt} - \nabla_i q^i + \tau^{ki} \nabla_i v_k + \Delta H,$$

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial \zeta_j} + \frac{\partial v_j}{\partial \zeta_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \frac{\partial v_m}{\partial \zeta_m}, \quad q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial \zeta_i},$$

Уравнения возникновения и переноса кинетической энергии турбулентности и частоты турбулентных пульсаций (согласно K- ω модели)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho K) + \frac{\partial}{\partial \zeta_j} (\rho \bar{v}_j K) = \frac{\partial}{\partial \zeta_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial \zeta_j} \right] +$$

$$+ P_K - \beta_0^* \rho K \omega,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial \zeta_j} (\rho \bar{v}_j \omega) = \frac{\partial}{\partial \zeta_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial \zeta_j} \right] +$$

$$+ \alpha_3 \frac{\omega}{K} P_K - \beta_3 \rho \omega^2,$$

где ρ – плотность жидкости; ζ^i – i -тая координата в пространстве; v_i – i -тая компонента скорости; $\bar{F}$ – плотность массовой силы; $\bar{p}^i$ – компоненты вектора нормальных напряжений; ∇_i – оператор Гамильтона; $p^{ki} = -p g^{ki} + \tau^{ki}$ – компоненты тензора напряжений; $\bar{q}$ – тепловой поток; p – давление; $h = C_p T$ – удельная энтальпия; δ_{ij} – символ Кронекера; μ – вязкость смеси; λ – теплопроводность смеси;

$\mu_T = \rho \frac{K}{\omega}$, – турбулентный коэффициент вязкости;

$\beta_0^* = 0.09$, $\alpha = 5/9$, $\beta_0 = 0.075$, $\sigma_{K1} = 2$, $\sigma_{\omega1} = 2$ – стандартные параметры модели турбулентности

[8]; $P_K = -\overline{\rho v_i' v_j'} \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial \zeta_j}$ – генерация кинетической

энергии турбулентности; v_j' – пульсация компоненты вектора скорости; верхней чертой обозначены параметры, осредненные по Рейнольдсу; $\bar{v}_i$ – массовые доли компонентов смеси; Sc_T – турбулентное число Шмидта [8]; S_i – скорость образования i -го компонента; D_i – коэффициент диффузии i -го компонента; ΔH – выделение тепла вследствие протекания химической реакции.

В общем виде каждое из уравнений системы можно представить в следующем виде

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

где U – вектор параметров процесса (поле импульсов, поле температур, поле концентраций), F, G, H – вектора движущих сил, которые действуют на грани элементарного объема, содержащего эти параметры.

Например, для случая двумерного ламинарного течения жидкости в декартовой системе координат без учета поля температур (в дальнейшем во избежание громоздких выкладок конкретный вид формул будет приводиться именно для этого случая) вектора U, F будут иметь вид

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \tau_{xx} \\ \rho uv - \tau_{xy} \end{bmatrix}, G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho v^2 + p - \tau_{yy} \end{bmatrix},$$

где тензор напряжений равен

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} \right) & \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} \right) \end{bmatrix}.$$

Здесь и в дальнейшем были введены новые упрощенные обозначения по сравнению с исходной системой $v_1 = u$, $v_2 = v$, $\zeta_1 = x$, $\zeta_2 = y$.

Такая запись уравнений, позволяет перейти от системы к одному уравнению, записанному в векторном виде, что облегчает расчет и увеличивает его сходимость.

Перед тем, как решать получившееся уравнение (1), необходимо составить его дискретный аналог. Первый способ, которым это можно сделать, – разложить присутствующие в уравнении (1) производные в ряд Тейлора. Второй, более сложный, но более точный способ – применение метода контрольного объема. Суть этого метода заключается в интегрировании полученного уравнения по элементарному контрольному объему, что фактически превращает уравнение (1) в уравнение баланса по каж-

дому параметру, не давая им «исчезать» в результате погрешностей на каждом шаге расчета

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V U dV + \iiint_V \left(\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} \right) dV = 0.$$

Проведя дискретизацию уравнения (1) по равномерной сетке, изображенной на рис.1, получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint U dx dy + \int (F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}) dy + \int (G_{i,j+1/2} - G_{i,j-1/2}) dx = 0,$$

или при переходе к конечным разностям

$$\frac{\Delta U_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} + \frac{(F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j})}{\Delta x} + \frac{(G_{i,j+1/2} - G_{i,j-1/2})}{\Delta y} = 0, \quad (2)$$

где Δt – величина шага по времени; $\Delta x, \Delta y$ – расстояния между соседними узлами сетки; нижние индексы показывают координаты ячейки сетки, верхние – шаг по времени.

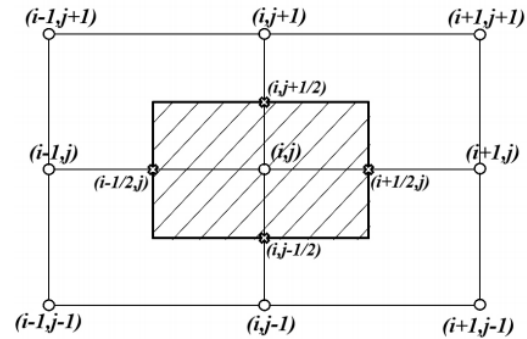


Рис. 1 – Нумерация ячеек в равномерной прямоугольной сетке. Заштрихованная область – малый контрольный объем

Так как поле векторов F и G в каждой момент времени определяется значением U , то можно связать их приращения во времени с приращениями U (верхний индекс – номер шага по времени):

$$F^{n+1} = F^n + \left(\frac{\partial F}{\partial U} \right)^n \delta U^{n+1}, \quad G^{n+1} = G^n + \left(\frac{\partial G}{\partial U} \right)^n \delta U^{n+1}.$$

Здесь и далее δ обозначает приращение параметров. Эта схема называется явной схемой решения (движущая сила процесса определяется состоянием параметров на текущем шаге), она не обладает безусловной устойчивостью, то есть решение будет устойчиво только при определенных соотношениях Δt и Δx . Поэтому лучше использовать неявную (движущая сила на данном шаге зависит от параметров на следующем шаге) или смешанную схему решения [8] (смешанная схема была заложена в алгоритм в дальнейшем):

$$F = (1 - \alpha) F^n + \alpha F^{n+1} = F^n + \alpha \left(\frac{\partial F}{\partial U} \right)^n \delta U^{n+1},$$

$$G = (1 - \alpha) G^n + \alpha G^{n+1} = G^n + \alpha \left(\frac{\partial G}{\partial U} \right)^n \delta U^{n+1},$$

где α – показывает долю неявной компоненты в схеме. При $\alpha \geq 0.5$ (преимущественно неявная схе-

ма) решение обладает безусловной устойчивостью [8].

Для удобства моделирования разделим вектор движущих сил на конвективную F_C , G_C и вязкую F_V , G_V составляющие

$$F = F_C + F_V, \quad G = G_C + G_V,$$

где

$$F_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -\tau_{xx} \\ -\tau_{yx} \end{bmatrix}, \quad G_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \end{bmatrix},$$

$$F_C = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho v u \end{bmatrix}, \quad G_C = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + p \end{bmatrix},$$

а также введем более удобный вектор параметров

$$V = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2/U_1 \\ U_3/U_1 \end{bmatrix},$$

где U_1 , U_2 , U_3 – компоненты вектора U .

Тогда вектора F_V и G_V можно представить в следующем виде

$$F_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -\mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ -\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{bmatrix} = -\mu \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \end{bmatrix} -$$

$$-\mu \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} = M_{FX} \frac{\partial V}{\partial x} + M_{FY} \frac{\partial V}{\partial y}, \quad (3)$$

$$G_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ -\mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} \right) \end{bmatrix} = -\mu \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \end{bmatrix} -$$

$$-\mu \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} = M_{GX} \frac{\partial V}{\partial x} + M_{GY} \frac{\partial V}{\partial y}. \quad (4)$$

где M_{FX} , M_{FY} , M_{GX} , M_{GY} – матрицы свойств среды.

Возвращаясь к предыдущему вектору параметров, получаем

$$F_V = M_{FX} \frac{\partial V}{\partial x} + M_{FY} \frac{\partial V}{\partial y},$$

$$G_V = M_{GX} \frac{\partial V}{\partial x} + M_{GY} \frac{\partial V}{\partial y},$$

где матрица перехода

$$\frac{\partial V}{\partial U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{U_2}{U_1^2} & \frac{1}{U_1} & 0 \\ -\frac{U_3}{U_1^2} & 0 & \frac{1}{U_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{u}{\rho} & \frac{1}{\rho} & 0 \\ -\frac{v}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} \end{bmatrix}.$$

Однако в случае несжимаемой жидкости выражения (3) и (4) могут быть упрощены. При условии

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

сумма $\frac{\partial F_V}{\partial x} + \frac{\partial G_V}{\partial y}$ в проекциях на оси координат

будет равна

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} &= \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \\ &= \mu \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) = \\ &= \mu \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) = \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right), \\ \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} &= \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \\ &= \mu \left(\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial y}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = \\ &= \mu \left(\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \end{aligned}$$

То есть без ущерба для точности расчета вязкие члены можно принять равными

$$F_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ -\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{bmatrix} = -\mu \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \end{bmatrix} =$$

$$= M_{FX} \frac{\partial V}{\partial x} = M_{FX} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x},$$

$$G_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ -\mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) \end{bmatrix} = -\mu \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} =$$

$$= M_{GY} \frac{\partial V}{\partial y} = M_{GY} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y}.$$

Тогда в случае смешанной дискретной схемы выражения для вязких потоков на границах контрольного объема будут выглядеть так:

$$\left(G_V^{n+1} \right)_{i,j-1/2} = \left(G_V^n \right)_{i,j-1/2} + \alpha M_{GX} \left(\frac{\partial V}{\partial U} \right)^n \frac{\partial}{\partial y} \delta U^{n+1} =$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\rho_{i,j}^n + \rho_{i,j-1}^n}{2} \\ \frac{\rho_{i,j}^n u_{i,j}^n + \rho_{i,j-1}^n u_{i,j-1}^n}{2} \\ \frac{\rho_{i,j}^n v_{i,j}^n + \rho_{i,j-1}^n v_{i,j-1}^n}{2} \end{bmatrix} -$$

$$-\alpha \mu \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{u_{i,j-1} + u_{i,j}}{\rho_{i,j-1} + \rho_{i,j}} & \frac{2}{\rho_{i,j-1} + \rho_{i,j}} & 0 \\ \frac{v_{i,j-1} + v_{i,j}}{\rho_{i,j-1} + \rho_{i,j}} & 0 & \frac{2}{\rho_{i,j-1} + \rho_{i,j}} \end{bmatrix} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} \frac{\delta \rho_{i,j}^{n+1} - \delta \rho_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \\ \frac{\delta(\rho_{i,j}^{n+1} u_{i,j}^{n+1}) - \delta(\rho_{i,j-1}^{n+1} u_{i,j-1}^{n+1})}{\Delta y} \\ \frac{\delta(\rho_{i,j}^{n+1} v_{i,j}^{n+1}) - \delta(\rho_{i,j-1}^{n+1} v_{i,j-1}^{n+1})}{\Delta y} \end{bmatrix}.$$

Аналогичным образом выражаются оставшиеся $G_{V,i,j+1/2}^{n+1}$, $F_{V,i+1/2,j}^{n+1}$, $F_{V,i-1/2,j}^{n+1}$.

При моделировании конвективных членов, для того чтобы решение было устойчиво, необходимо применить схему с разностями против потока [8-10].

Суть схемы заключается в следующем.

Если имеется уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

нужно применять схему

$$\frac{\delta u_i}{\Delta t} + c \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = 0, \text{ при } c > 0$$

и

$$\frac{\delta u_i}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} = 0, \text{ при } c < 0.$$

То есть

$$\frac{\delta u_i}{\Delta t} + c_+ \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + c_- \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} = 0,$$

$$c_+ = \max(c, 0), \quad c_- = \min(c, 0).$$

В нашем случае получаем

$$\frac{\partial F_c}{\partial x} + \frac{\partial G_c}{\partial y} = \frac{\partial F_c}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial G_c}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y} =$$

$$= \frac{\partial F_c}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial G_c}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y}$$

Обозначив

$$A_{F_c} = \frac{\partial F_c}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial U},$$

$$A_{G_c} = \frac{\partial G_c}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial U},$$

в отсутствии вязких потоков, получаем

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A_{F_c} \frac{\partial U}{\partial x} + A_{G_c} \frac{\partial U}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + S_{F_c} \Lambda_{F_c} (S_{F_c})^{-1} \frac{\partial U}{\partial x} + S_{G_c} \Lambda_{G_c} (S_{G_c})^{-1} \frac{\partial U}{\partial y} = 0$$

где S_{F_c} – некоторая вспомогательная матрица (матрица преобразования подобия), позволяющая перейти к диагонализированной матрице Λ_{F_c} .

Это уравнение мы можем расщепить на 3 отдельных, каждое из которых можно дискретизировать с применением разностей против потока. Применив после этого обратные преобразования, получим

$$\frac{\delta U_{i,j}}{\Delta t} + S_{F_c} \Lambda_{F_c+} (S_{F_c})^{-1} \frac{U_{i,j} - U_{i-1,j}}{\Delta x} +$$

$$+ S_{F_c} \Lambda_{F_c-} (S_{F_c})^{-1} \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{\Delta x} +$$

$$+ S_{G_c} \Lambda_{G_c+} (S_{G_c})^{-1} \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{\Delta y} +$$

$$+ S_{G_c} \Lambda_{G_c-} (S_{G_c})^{-1} \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{\Delta y} = 0 \quad (5)$$

где

$$\Lambda_{F_c+} = \begin{pmatrix} \lambda_{1+}^{F_c} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{2+}^{F_c} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{3+}^{F_c} \end{pmatrix}, \quad \Lambda_{F_c-} = \begin{pmatrix} \lambda_{1-}^{F_c} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{2-}^{F_c} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{3-}^{F_c} \end{pmatrix},$$

$$\lambda_+ = \max(\lambda, 0), \quad \lambda_- = \min(\lambda, 0),$$

λ – собственные числа матрицы A_{F_c} . Аналогичные выражения записываются и для матрицы A_{G_c} . Матрица преобразования подобия $S = (s_1 \ s_2 \ s_3)$ – это матрица, состоящая из компонент собственных векторов A_{F_c} (каждый вектор s_i – один столбец).

Из уравнения (5) следует, что конвективные потоки с дробными индексами следует считать по формулам:

$$\begin{aligned}
F_{i+1/2,j} &= S_{F_C} \Lambda_{F_C+} (S_{F_C})^{-1} U_{i,j} + S_{F_C} \Lambda_{F_C-} (S_{F_C})^{-1} U_{i+1,j}, \\
F_{i-1/2,j} &= S_{F_C} \Lambda_{F_C+} (S_{F_C})^{-1} U_{i-1,j} + S_{F_C} \Lambda_{F_C-} (S_{F_C})^{-1} U_{i,j}, \\
G_{i,j+1/2} &= S_{G_C} \Lambda_{G_C+} (S_{G_C})^{-1} U_{i,j} + S_{G_C} \Lambda_{G_C-} (S_{G_C})^{-1} U_{i,j+1}, \\
G_{i,j-1/2} &= S_{G_C} \Lambda_{G_C+} (S_{G_C})^{-1} U_{i,j-1} + S_{G_C} \Lambda_{G_C-} (S_{G_C})^{-1} U_{i,j}.
\end{aligned}$$

Так как в уравнениях исходной системы присутствуют производные второго порядка, в дискретной схеме расчета необходимо использовать второй порядок аппроксимации параметров для явной части, а именно

$$\begin{aligned}
U_L &= \frac{1}{2}(3U_i - U_{i-1}), \\
U_R &= \frac{1}{2}(3U_{i+1} - U_{i+2}), \\
U_{LR} &= \frac{U_L + U_R}{2}.
\end{aligned}$$

Для неявной части можно ограничиться первым порядком аппроксимации (так как неявная часть неизвестна на каждом шаге расчета, аппроксимация более высоких порядков будет увеличивать число неизвестных)

$$\begin{aligned}
U_L &= U_i, \\
U_R &= U_{i+1}.
\end{aligned}$$

Таким образом, для конвективных потоков получаем

$$\begin{aligned}
(F_C)_{i+1/2,j} &= \\
&= A_{F_C+} \left(\frac{(-U_{i-1,j}^n + 3U_{i,j}^n + 3U_{i+1,j}^n - U_{i+2,j}^n)}{4} \right) \left(\frac{3U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n}{2} \right) + \\
&+ A_{F_C-} \left(\frac{(-U_{i-1,j}^n + 3U_{i,j}^n + 3U_{i+1,j}^n - U_{i+2,j}^n)}{4} \right) \left(\frac{3U_{i+1,j}^n - U_{i+2,j}^n}{2} \right) + \\
&+ \alpha A_{F_C+} \left(\frac{(U_{i,j}^n + U_{i+1,j}^n)}{2} \right) (\delta U)_{i,j}^{n+1} + \\
&+ \alpha A_{F_C-} \left(\frac{(U_{i,j}^n + U_{i+1,j}^n)}{2} \right) (\delta U)_{i+1,j}^{n+1}.
\end{aligned} \quad (6)$$

Аналогичным образом выражаются оставшиеся $G_{C_{i,j+1/2}}^{n+1}$, $G_{C_{i+1/2,j}}^{n+1}$, $F_{C_{i-1/2,j}}^{n+1}$.

В конечном итоге, дискретная схема примет вид

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta U_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} + \frac{((F_C)_{i+1/2,j} + (F_V)_{i+1/2,j} - (F_C)_{i-1/2,j} - (F_V)_{i-1/2,j})}{\Delta x} + \\
&+ \frac{((G_C)_{i,j+1/2} + (G_V)_{i,j+1/2} - (G_C)_{i,j-1/2} - (G_V)_{i,j-1/2})}{\Delta y} = 0,
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
(F_C)_{i+1/2,j} &= (F_C)_{i+1/2,j}^n + \\
&+ \alpha \left[(A_{F_C+})_{i+1/2,j}^n (\delta U)_{i,j}^{n+1} + (A_{F_C-})_{i+1/2,j}^n (\delta U)_{i+1,j}^{n+1} \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(F_C)_{i-1/2,j} &= (F_C)_{i-1/2,j}^n + \\
&+ \alpha \left[(A_{F_C+})_{i-1/2,j}^n (\delta U)_{i-1,j}^{n+1} + (A_{F_C-})_{i-1/2,j}^n (\delta U)_{i,j}^{n+1} \right], \\
(G_C)_{i,j+1/2} &= (G_C)_{i,j+1/2}^n + \\
&+ \alpha \left[(A_{G_C+})_{i,j+1/2}^n (\delta U)_{i,j}^{n+1} + (A_{G_C-})_{i,j+1/2}^n (\delta U)_{i,j+1}^{n+1} \right], \\
(G_C)_{i,j-1/2} &= (G_C)_{i,j-1/2}^n + \\
&+ \alpha \left[(A_{G_C+})_{i,j-1/2}^n (\delta U)_{i,j-1}^{n+1} + (A_{G_C-})_{i,j-1/2}^n (\delta U)_{i,j}^{n+1} \right], \\
(F_V)_{i+1/2,j} &= (F_V)_{i+1/2,j}^n + \alpha L_{i+1/2,j}^n \frac{1}{\Delta x} \left[(\delta U)_{i+1,j}^{n+1} - (\delta U)_{i,j}^{n+1} \right], \\
(F_V)_{i-1/2,j} &= (F_V)_{i-1/2,j}^n + \alpha L_{i-1/2,j}^n \frac{1}{\Delta x} \left[(\delta U)_{i,j}^{n+1} - (\delta U)_{i-1,j}^{n+1} \right], \\
(G_V)_{i,j+1/2} &= (G_V)_{i,j+1/2}^n + \alpha N_{i,j+1/2}^n \frac{1}{\Delta y} \left[(\delta U)_{i,j+1}^{n+1} - (\delta U)_{i,j}^{n+1} \right], \\
(G_V)_{i,j-1/2} &= (G_V)_{i,j-1/2}^n + \alpha N_{i,j-1/2}^n \frac{1}{\Delta y} \left[(\delta U)_{i,j}^{n+1} - (\delta U)_{i,j-1}^{n+1} \right], \\
L &= M_{FX} \left(\frac{\partial V}{\partial U} \right), \\
N &= M_{GX} \left(\frac{\partial V}{\partial U} \right),
\end{aligned}$$

I - единичная матрица.

После преобразований выражения (6) получаем

$$\begin{aligned}
&\delta U_{i,j}^{n+1} \left[I + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x} \left((A_{F_C+})_{i+1/2,j}^n - (A_{F_C-})_{i-1/2,j}^n \right) + \right. \\
&+ \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y} \left((A_{G_C+})_{i,j+1/2}^n - (A_{G_C-})_{i,j-1/2}^n \right) - \\
&- \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (L_{i+1/2,j}^n - L_{i-1/2,j}^n) - \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y^2} (N_{i,j+1/2}^n - N_{i,j-1/2}^n) \left. \right] + \\
&+ \delta U_{i+1,j}^{n+1} \left(\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x} (A_{F_C+})_{i+1/2,j}^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} L_{i+1/2,j}^n \right) + \\
&+ \delta U_{i-1,j}^{n+1} \left(-\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x} (A_{F_C+})_{i-1/2,j}^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} L_{i-1/2,j}^n \right) + \\
&+ \delta U_{i,j+1}^{n+1} \left(\frac{\alpha \Delta t}{\Delta y} (A_{G_C+})_{i,j+1/2}^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y^2} N_{i,j+1/2}^n \right) + \\
&+ \delta U_{i,j-1}^{n+1} \left(-\frac{\alpha \Delta t}{\Delta y} (A_{G_C+})_{i,j-1/2}^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y^2} N_{i,j-1/2}^n \right) = \\
&- \frac{\Delta t \left((F_C)_{i+1/2,j}^n - (F_C)_{i-1/2,j}^n + (F_V)_{i+1/2,j}^n - (F_V)_{i-1/2,j}^n \right)}{\Delta x} - \\
&- \frac{\Delta t \left((G_C)_{i,j+1/2}^n - (G_C)_{i,j-1/2}^n + (G_V)_{i,j+1/2}^n - (G_V)_{i,j-1/2}^n \right)}{\Delta y},
\end{aligned}$$

или в общем виде (все известные на шаге по времени параметры объединены в матрицы $A_{i,j}$, $B_{i,j}$, $C_{i,j}$, $D_{i,j}$, $E_{i,j}$, $\Delta U_{i,j}^n$):

$$A_{i,j}\delta U_{i,j}^{n+1} + B_{i,j}\delta U_{i+1,j}^{n+1} + C_{i,j}\delta U_{i-1,j}^{n+1} + D_{i,j}\delta U_{i,j+1}^{n+1} + E_{i,j}\delta U_{i,j-1}^{n+1} = \Delta U_{i,j}^n. \quad (7)$$

Система (7) описывается пятидиагональной матрицей. Используем метод расщепления по координатам, разбив эту систему на две, описывающихся трехдиагональными матрицами [8]. Суть этого метода заключается в разделении системы уравнений на несколько с меньшим числом неизвестных, решаемых последовательно. Таким образом, на первом этапе шага по времени сначала осуществляется перенос параметров в направлении одной из координат, на следующих этапах в направлении других. На разных шагах по времени порядок этапов меняется.

$$A_{i,j}\delta \tilde{U}_{i,j}^n + B_{i,j}\delta \tilde{U}_{i+1,j}^n + C_{i,j}\delta \tilde{U}_{i-1,j}^n = \Delta U_{i,j}^n, \quad (8)$$

$$A_{i,j}\delta U_{i,j}^{n+1} + D_{i,j}\delta U_{i,j+1}^{n+1} + E_{i,j}\delta U_{i,j-1}^{n+1} = \delta \tilde{U}_{i,j}^n, \quad (9)$$

где верхней волнистой линией показаны величины, получаемые на промежуточном этапе шага по времени.

После этого каждая из систем (8) и (9) решается методом прогонки по координатам [8-10].

Система

$$A_{i,j}\delta \tilde{U}_{i,j}^n + B_{i,j}\delta \tilde{U}_{i+1,j}^n + C_{i,j}\delta \tilde{U}_{i-1,j}^n = \Delta U_{i,j}^n$$

переписывается к виду

$$A\delta \tilde{U}^n = F^n,$$

Где

$$\delta \tilde{U}^n = \begin{bmatrix} \delta \tilde{U}_{1,j}^n \\ \delta \tilde{U}_{2,j}^n \\ \dots \\ \delta \tilde{U}_{m-1,j}^n \\ \delta \tilde{U}_{m,j}^n \end{bmatrix}, F^n = \begin{bmatrix} \Delta U_{1,j}^n \\ \Delta U_{2,j}^n \\ \dots \\ \Delta U_{m-1,j}^n \\ \Delta U_{m,j}^n \end{bmatrix},$$

$$A = \begin{bmatrix} A_{1,j} & B_{2,j} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ C_{1,j} & A_{2,j} & B_{3,j} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{2,j} & A_{3,j} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & A_{m-2,j} & B_{m-1,j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C_{m-2,j} & A_{m-1,j} & B_{m,j} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C_{m-1,j} & A_{m,j} \end{bmatrix}.$$

Матрица A приводится к наддиагональному виду путем следующих преобразований

$$A'_{1,j} = A_{1,j},$$

$$A'_{i,j} = A_{i,j} - \frac{C_{i,j}}{A'_{i-1,j}} B_{i-1,j},$$

$$A' = \begin{bmatrix} A'_{1,j} & B_{2,j} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A'_{2,j} & B_{3,j} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A'_{3,j} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & A'_{m-2,j} & B_{m-1,j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & A'_{m-1,j} & B_{m,j} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & A'_{m,j} \end{bmatrix}.$$

Соответственно

$$F^n = \begin{bmatrix} \Delta U_{1,j}^n \\ \Delta U_{2,j}^n \\ \dots \\ \Delta U_{m-1,j}^n \\ \Delta U_{m,j}^n \end{bmatrix},$$

$$\text{где } \Delta U'_{1,j} = \Delta U_{1,j}, \Delta U'^n_{i,j} = \Delta U_{i,j}^n - \frac{C_{i,j}}{A'_{i-1,j}} \Delta U_{i-1,j}^n.$$

После этого $\delta \tilde{U}^n$, начиная с $\delta \tilde{U}_{m,j}^n$, можно вычислить по формулам

$$\delta \tilde{U}_{m,j}^n = \frac{\Delta U_{m,j}^n}{A'_{m,j}},$$

$$\delta \tilde{U}_{i,j}^n = \frac{\Delta U_{i,j}^n - B_{i,j} \delta \tilde{U}_{i+1,j}^n}{A'_{i,j}}.$$

Затем аналогичные действия повторяются для системы (9). На этом шаг по времени завершается, и расчет полностью повторяется на следующем шаге. Таким образом расчет полей скоростей, температур и концентраций в реакторе заключается в повторяющемся расчете систем (8) и (9) на каждом шаге по времени. Предложенный алгоритм применим и для расчета стационарных процессов. При этом фактически происходит расчет установившегося стационарного процесса во времени. В этом случае метод решения называется методом установления во времени [8-10].

Заключение

Таким образом, в работе был разработан алгоритм расчета гидродинамических и температурных условий в реакторе синтеза БК с применением методов вычислительной гидродинамики: была сформирована система исходных уравнений, описывающих взаимовлияющие процессы переноса концентраций реагентов и тепла, осложненные протеканием химических превращений при сополимеризации; описан алгоритм дискретизации системы уравнений по методу контрольного объема; описан алгоритм получения смешанной дискретной схемы расчета, в котором приведен пример расчета вязких и конвективных потоков; описан алгоритм решения полученной системы последовательным применением методов расщепления по координатам и прогонки по координатам; для решения стационарных во

времени задач был предложен метод установления. Предложенный алгоритм позволяет моделировать гидродинамические, температурные условия и кинетику химического процесса в стандартном, а также в перспективном трубчатом реакторах [11] синтеза БК. На основе рассчитываемых данных в дальнейшем может быть получено адекватное ММР БК, что даст возможность оценивать и управлять его физико-механическими свойствами.

Литература

1. Улитин Н.В. Кинетика катионной сополимеризации изобутилена с изопреном в неизотермической постановке задачи / Н.В. Улитин, К.А. Терещенко, Р.Р. Набиев, Т.Р. Дебердеев, Р.Я. Дебердеев, Э.Р. Гизатова, С.И. Спивак // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – Т. 16, №19. – С. 193-200.
2. Ибрагимли Д.Ш. Идентификация процесса полимеризации при разработке АСУ ТП производства бутилкаучука / Известия вузов. Нефть и газ. – 1985. – №7. – С. 86-90.
3. Сангалов Ю.А. Полимеры и сополимеры изобутилена: Фундаментальные проблемы и прикладные аспекты. Уфа: Гилем, 2001. 384 с.
4. Маркина Е.А. Синтез бутилкаучука с использованием модифицированной каталитической системы на основе хлористого алюминия: автореф. дис. канд. хим. наук: 18.03.2010, 21.04.2010 / Маркина. – Казань, 2010. С.19.
5. Yasuyuki Tanaka // Progress in Polymer Science. 1989. V. 14. Iss. 3. P. 339-371.
6. Kennedy J. P. // Journal of Macromolecular Science: Part A: Pure and Applied Chemistry. 1982. Vol. A18. Iss. 1. P. 129-152.
7. Кеннеди Дж. Катионная полимеризация. Пер. с англ. под ред. П. Плеша. Москва: Мир, 1966. 584 с.
8. Аникеев А. А. Основы вычислительного теплообмена и гидродинамики / А. А. Аникеев, А. М. Молчанов, Д. С. Янышев. - М. : URSS, 2009. - 149 с.
9. Франк А. М. Дискретные модели несжимаемой жидкости / А. М. Франк. - М. : Физматлит, 2001. - 206 с.
10. Труды ИБРАЭ. Вып. 3. Методы вычислительной гидродинамики для анализа безопасности объектов ТЭК / науч. ред. В. Ф. Стрижов. - М. : Наука, 2008. - 207 с.
11. Захаров В. П. Физико-химические основы протекания быстрых жидкофазных процессов / В.П. Захаров, А.А.Берлин, Ю.Б.Монаков, Р.Я.Дебердеев. - М: Наука, 2008. – 348 с.

© **К. А. Терещенко** – асп. каф. технологии переработки полимеров и композиционных материалов КНИТУ, nucleurmind@yandex.ru; **Н. В. Улитин** – д.х.н., проф. каф. технологии переработки полимеров и композиционных материалов КНИТУ, n.v.ulitin@mail.ru; **Р. Р. Набиев** – асп. той же кафедры, nabievrafit@mail.ru.