МНОГОМАСШТАБНЫЙ ПОДХОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ ФЛЮИДОВ В УСТАНОВКАХ ПО ПЕРЕРАБОТКЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ТОПЛИВ

@ В.О. Подрыга, С.В. Поляков, М.А. Трапезникова,
Н.Г. Чурбанова
pvictoria@list.ru

УДК 519.6 DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.102

Рассматривается проблема моделирования многофазных течений жидкости и газа в пористой среде, возникающая в технологии очистки природных углеводородов от вредных примесей. Предложен многомасштабный подход для расчета подобных течений, предполагающий разделение модели по пространственно-временным масштабам и физическим процессам. Макроскопические компоненты модели реализуются сеточными методами, микроскопические модели используют методы частиц. Подход ориентирован на использование высокопроизводительных вычислительных систем. На данном этапе исследования проведено согласование всех компонент многомасштабной модели.

Ключевые слова: математическое моделирование, многомасштабный подход, многофазные течения, переработка органических топлив, очистка природного газа

Multiscale approach for modeling multiphase fluid flows in installations for reprocessing organic fuels

The problem of modeling multiphase flows of liquid and gas in a porous medium, which arises in the technology of purification of natural hydrocarbons from harmful impurities, is considered. A multiscale approach is proposed for calculating such flows, which assumes the separation of the model by space-time scales and physical processes. Macroscopic components of the model are implemented with mesh

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 21-71-20054).

Подрыга Виктория Олеговна, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Россия); Viktoriia Podryga (Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow, Russia)

Поляков Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Россия); Sergey Polyakov (Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow, Russia)

Трапезникова Марина Александровна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Россия); Marina Trapeznikova (Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow, Russia)

Чурбанова Наталья Геннадьевна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Россия); Natalia Churbanova (Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow, Russia)

methods, microscopic models use particle methods. The approach is focused on the use of HPC systems. At this stage of the study, the coordination of all components of the multiscale model has been carried out.

Keywords: mathematical modeling, multiscale approach, multiphase flows, reprocessing of organic fuels, purification of natural gas

Работа посвящена разработке многомасштабных подходов [1-3] для моделирования многофазных течений жидких и газообразных углеводородов в установках по переработке органических топлив. Одним из важных этапов такой переработки является очистка сырой нефти или природного газа от различного рода загрязнений (металлических частиц, твердых органических соединений и др.). Для моделирования процессов очистки нами предложены многоуровневые математические модели, сочетающие макроскопические и микроскопические описания течений многофазных флюидов в канале очистной системы. В данной работе речь идет об очистке природного газа путем пропусканием его через пористый материал.

Общая математическая модель течения загрязненной газовой смеси состоит из двух основных компонент. Первая компонента связана с макроскопическими масштабами очистной системы и включает модифицированные квазигазодинамические (КГД) уравнения [4-5] для смеси газов, дополненные уравнениями конвекции-диффузии для концентраций частиц твердых примесей. Вторая компонента модели описывает процессы в пограничных слоях и базируется на уравнениях молекулярной динамики (МД) [6]. Целью работы являлась физически обоснованная реализация сопряжения компонент модели.

На макроскопическом масштабе использована модель расчета неизоэнтальпического течения многофазной слабосжимаемой жидкости через пористую среду, являющаяся аналогом системы КГД уравнений [4-5], записанная в гиперболической форме [7-8]. Требования консервативности требуют учета в модели многокомпонентного состава флюидов. Законы сохранения в предложенной формулировке модели выполняются покомпонентно и для каждой фазы. Уравнение баланса массы включает в себя регуляризирующий член и производную по времени второго порядка с малыми параметрами, имеющими смысл минимальных эталонных масштабов в пространстве и во времени. Уравнение аппроксимируется трехуровневой явной разностной схемой со вторым порядком аппроксимации во времени и в пространстве и с довольно мягким условием устойчивости. Модель включает в себя одно уравнение сохранения полной энергии, измененное по аналогии с КГД уравнениями и аппроксимированное явной схемой. Фазовые плотности, а также вязкости зависят от

многокомпонентного состава. Константы фазового равновесия указаны для всех компонентов, которые должны быть конденсированы. Модель учитывает гравитационные и капиллярные силы, включает сильно нелинейные функции относительной фазовой проницаемости.

Для численной реализации макроскопической модели был разработан алгоритм явного типа. Проверка чистой макроскопической модели (без уравнений конвекции-диффузии и без МД) была проведена с помощью широкого спектра тестовых прогнозов извлечения углеводородов, проникновения загрязняющих веществ в почву, потоков с фазовыми переходами в технологических объектах. Получены физически корректные результаты, хорошее согласие с результатами других авторов [9-10] было достигнуто. Была продемонстрирована высокая эффективность распараллеливания на CPU ядрах и на графических процессорах гибридного суперкомпьютера.

На микрокопическом масштабе в качестве модели используется метод молекулярной динамики [6]. Эволюция исследуемой системы микрочастиц описывается уравнениями Ньютона. МД описывает взаимодействия частиц с ограничивающими среду поверхностями, в том числе проникновение в поры, процессы в самих порах и в их пограничных слоях. Для интегрирования уравнений используется схема Верле, которая позволяет статистически правильно воспроизводить поведение частиц среды в течение большого промежутка времени.

Проведенные предварительные численные эксперименты позволили определить параметры согласования компонент модели и подтвердили возможность ее применения к выбранному классу задач. Представленную модель планируется в будущем расширять на случай многокомпонентных течений, содержащих твердые, жидкие и газообразные фазы.

Литература

1. Polyakov S.V., Podryga V.O., Puzyrkov D.V. High performance computing in multiscale problems of gas dynamics // *LJM*, **39:9** (2018), 1239-1249.
2. Podryga V.O., Polyakov S.V. Multiscale mathematical modeling of the metal nanoparticles motion in a gas flow // *LNCS*, **11386** (2019), 387-394
3. Подрыга В.О. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // *ДАН*, **469:6** (2016), 656-658.
4. Chetverushkin B.N. Kinetic Schemes and Quasi-Gas Dynamic System of Equations. — Barcelona: CIMNE, 2008.
5. Elizarova T.G. Quasi-Gas Dynamic Equations. — Berlin, Heidelberg: Springer, 2009.
6. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulations. Second Edition. — Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
7. Chetverushkin B., Churbanova N., Kuleshov A., Lyupa A., Trapeznikova M.

Application of kinetic approach to porous medium flows simulation in environmental hydrology problems on high-performance computing systems // Rus. J. Numer. Anal. Math. Modelling, **31**:4 (2016), 187-196.

8. Trapeznikova M., Churbanova N., Lyupa A. CMMSE 2019: an explicit algorithm for the simulation of non-isothermal multiphase multicomponent flow in a porous medium // *J. Math. Chem.*, **58**:3 (2020), 595-611.

9. Pinder G.F., Gray W.G. *Essentials of Multiphase Flow and Transport in Porous Media*. — John Wiley&Sons, 2008.

10. Class H., Helmig R., Bastian P. Numerical simulation of non-isothermal multiphase multicomponent processes in porous media // *Adv. Water Resour.*, **25** (2002), 533-550.