

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ: ОПИСАНИЕ ПОДХОДА, ТЕКУЩАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ В FLOWVISION

С. В. Жлуктов, Ю.В. Фишер,
ООО «ТЕСИС», г. Москва, Российская Федерация

1. Введение

Математическое моделирование течения жидкости или газа с фазовыми превращениями представляет большой практический интерес при разработке изделий общего и специального машиностроения, а также объектов перерабатывающей промышленности. Моделирование процесса изменения агрегатного состояния имеет ряд особенностей, а его успешная реализация зависит от множества факторов, которые необходимо учитывать разработчикам инструментов вычислительной гидродинамики. В данной работе представлено описание математического аппарата программного комплекса FlowVision предназначенного для моделирования многофазных и многокомпонентных потоков с учетом химических реакций и фазовых переходов. Отражена концептуальная часть, дано описание моделируемых рабочих процессов и приведены используемые базовые уравнения, описывающие.

2. Текущая реализация в ПК FlowVision

Концепция моделирования физических процессов с наличием фазовых переходов требует создания такой архитектуры программного комплекса **FlowVision**, которая бы позволяла с достаточной степенью простоты работать с подобными сложными постановками задачи широкому спектру пользователей в промышленности без потери в качестве получаемого решения. Концепция моделирования многофазных течений с фазовыми переходами предполагает возможность моделирования следующих процессов:

- многофазные потоки, разделенные границей раздела с учетом сил поверхностного натяжения;
- многокомпонентные фазы с содержанием в себе множества перемешивающихся компонент;
- описание фазы фаза как сплошной или дисперсной;
- механизм фазового перехода реализуется по схеме сплошная-сплошная, сплошная – дисперсная в оба направления и в любой комбинации последовательностей

Модель дисперсной среды позволяет решать следующие задачи:

- течение жидкости/газа в пористом каркасе;
- движение твердых частиц в жидкости/газе;
- движение капель в жидкости/газе;
- движение пузырей в жидкости.

Можно задавать различные физические процессы, протекающие в дисперсной фазе: теплоперенос, перенос фазы, движение и массоперенос. Для взаимодействия со сплошной средой задаются модели, посредством которых учитывается обмен массой (абляция/конденсация), импульсом (силовое взаимодействие), энергией (теплообмен) между дисперсной и несущей (сплошной) средами.

Процесс переноса фазы моделируется при помощи решения неоднородного конвективно-диффузионного уравнения для концентрации частиц:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}_p n_p) = \nabla \cdot \left(\frac{V_{t,p}}{Sc_{t,p}} \nabla n_p \right) + Q_n,$$

$$V_{t,p} = V_{t,c},$$

где n_p - концентрация частиц, м³; \mathbf{V}_p - скорость дисперсной фазы, м/с; Q_n - скорость образования/уничтожения частиц данного семейства, 1/(м³с); $V_{t,p}$ - кинематический коэффициент турбулентной вязкости дисперсной фазы, м²/с; $V_{t,c}$ - кинематический коэффициент турбулентной вязкости сплошной фазы, м²/с; $Sc_{t,p}$ - турбулентное число Шмидта (безразмерный параметр, характеризующий турбулентную диффузию частиц).

Процесс движения дисперсной фазы описывается уравнением, решаемым относительно скорости частиц:

$$\frac{\partial (n_p V_{p,i})}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}_p n_p V_{p,i}) = \nabla \cdot \left(\frac{V_{t,p}}{Sc_{t,p}} \nabla (n_p V_{p,i}) \right) - n_p \frac{1}{\rho_p} \nabla_i P + \frac{1}{\rho_p} F_{rep,i} + n_p g_i + Q_V$$

$$\mathbf{Q}_V = Q_n \mathbf{V}_c + \frac{1}{M_p} n_p \rho_c \frac{1}{2} C_D \pi r_p^2 |\mathbf{V}_c - \mathbf{V}_p| (\mathbf{V}_c - \mathbf{V}_p),$$

$$F_{rep,i} = -A_{rep} \exp(-B_{rep}(\varphi_{p,max} - \varphi_p)) \nabla n_p,$$

где P - давление, Па; ρ_p - плотность материала частиц, кг/м³; ρ_c - плотность сплошной фазы, кг/м³; A_{rep} - коэффициент в реализованной модели расталкивания частиц, Па; B_{rep} - коэффициент в реализованной модели расталкивания частиц; $\varphi_{p,max}$ - максимально допустимый относительный объем дисперсной фазы в ячейке; C_D - коэффициент сопротивления частиц (реализовано 5 моделей); \mathbf{V}_c - скорость сплошной фазы, м/с.

Перенос энергии частиц моделируется при решении уравнения относительно температуры частиц:

$$\frac{\partial(n_p T_p)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\mathbf{v}}_p n_p T_p) = \bar{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{v_{t,p}}{Sc_{t,p}} \bar{\nabla}(n_p T_p) \right) \right) + n_d \frac{1}{C_{p,p}(T_p) M_p} Q_T + \dot{n}_p T_p$$

$$Q_T = \pi d^2 \left[Nu_p \frac{\lambda_c}{d} (T_c - T_p) + \sigma_{rad} \epsilon_{rad} (T_c^4 - T_p^4) - \dot{m} h_{lat}(T_p) \right],$$

$$Sc_{t,p} = Nu_p \lambda_c,$$

где T_p - температура дисперсной фазы (относительно опорной температуры), °; T_c - температура сплошной фазы (относительно опорной температуры), °; $C_{p,p}$ - удельная теплоёмкость дисперсной фазы, Дж/(кгК); $h_{lat}(T_p)$ - удельная теплота фазового перехода при локальной температуре частиц, Дж/(кгК). Для числа Нуссельта Nu_p , определяющего интенсивность массообмена с несущей фазой, реализованы две модели.

Процесс переноса массы дисперсной фазы описывается уравнением, решаемым относительно массы частиц:

$$\frac{\partial(n_p M_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_p n_p M_p) = \nabla \cdot \left(\frac{v_{t,p}}{Sc_{t,p}} \nabla(n_p M_p) \right) - Q_M + Q_n M_p,$$

$$Q_M = n_p \pi d^2 \dot{m}, \quad \dot{m} = \frac{Sh \mu_g}{Sc d} \Phi,$$

где M_p - локальная средняя (по ячейке) масса частиц данного семейства, кг; Q_M - скорость изменения массы частиц за счёт испарения (абляции)/конденсации, кг/(м³с); \dot{m} - удельная скорость уноса массы с поверхности частиц, кг/(м²с); d - локальный диаметр частиц данного семейства, м; μ_g - динамический коэффициент вязкости сплошной фазы, кг/(м с); Sh - число Шервуда (реализовано две модели); Sc - число Шмидта (моделирующее молекулярную диффузию продуктов абляции материала частиц); Φ - безразмерная величина, характеризующая удельную скорость уноса массы с поверхности частиц (испарение капель), для которой реализовано 5 моделей. Если в рамках одной модели взаимодействуют две фазы – дисперсная и сплошная, то испарение с поверхности частиц дисперсной фазы происходит посредством переноса массы в сплошную фазу. Аналогично можно задать сублимацию – переход из твердой фазы (дисперсной) в газовую (сплошную). При этом предпочтительно задавать коэффициент скорости переноса массы следующей моделью:

$$\Phi = \frac{Y_{1,sat}(T_p) - Y_1}{1 - Y_{1,sat}(T_p)},$$

где Y_1 - средняя массовая доля пара в объёме, занимаемом сплошной фазой (газа); $Y_{1,sat}(T_p)$ - массовая доля пара на поверхности частицы; T_p - средняя температура частиц в данной ячейке.

Уравнения, решаемые для сплошной среды с присутствием дисперсной фазы, модифицируются соответствующим образом с учетом массо- и теплообмена между фазами.

3. Пример использования

Объектом исследования является течение газозвушной смеси внутри резервуара хранения нефти при срабатывании автоматической системы газового пожаротушения (ГПТ). В качестве охлаждающего агента используется двуокись углерода (CO₂), хранящаяся в изотермическом модуле в жидкой фазе при давлении 2,95–3,05 МПа. При срабатывании системы ГПТ осуществляется подача жидкой углекислоты (ЖУ) из модуля хранения через систему трубопроводов к насадкам, расположенным равномерно по окружности резервуара. Истечение ЖУ внутрь резервуара происходит после открытия герметизирующих клапанов на насадках (см. Рис.1). Связь с атмосферой осуществляется с помощью выхлопного патрубка, установленного на крыше резервуара.

Целью работы является создание методики учета фазового перехода в динамическом изменении параметров газозвушной смеси и определение предельных нагрузок на конструкцию.

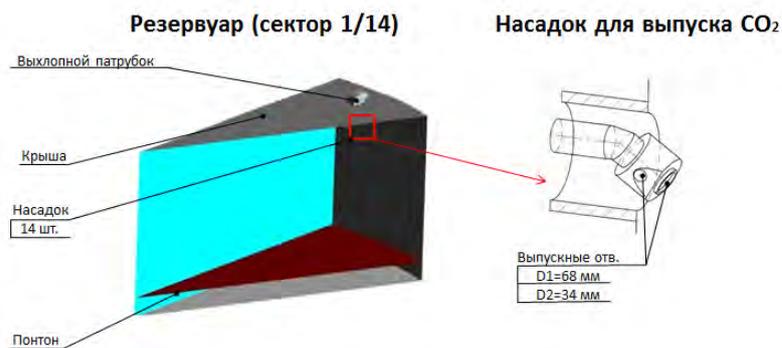


Рис.1 – Геометрическая модель. Характеристики резервуара: диаметр - 45,6 м; высота - 11,94 м; количество вентиляционных патрубков – 12; размеры вентиляционного патрубка - 550x550 мм. Характеристики системы пожаротушения: количество насадков – 14; углы наклона насадка 30° в горизонтальной и 10° в вертикальной плоскости

После разгерметизации насадков углекислота высокого давления (1,1-1,3 МПа) поступает внутрь резервуара с воздухом, находящимся при атмосферном давлении и низкой температуре (-30°C). Мгновенное снижение давления ЖУ, находящейся в трубопроводе, сопровождается ее переходом из жидкого состояния в газообразное. Понижение температуры приводит к тому, что часть углекислоты переходит в твердое состояние (лед). При разработке математической модели в программном комплексе **FlowVision** приняты следующие допущения:

- моделирование течения CO₂ выполняется в рамках многофазного приближения, где газовая фаза CO₂ и воздух моделируются как сплошная среда, а твердая фаза (углекислота в твердом состоянии) моделируется как дисперсная среда;
- со среза сечения насадков в резервуар поступает смесь дисперсной фазы и газовой фазы CO₂;
- по своим физическим свойствам частицы дисперсной фазы CO₂ соответствуют свойствам ЖУ;
- скорость движения частиц, а также температура твердой фазы и газовой (несущей) фазы CO₂ при входе в расчетную область одинакова;
- испарение дисперсной фазы происходит при давлении, соответствующем линии сублимации CO₂;
- теплообмен со стенками насадка не учитывается.

Предварительно была проведена оценка параметров процесса истечения. Массовая доля испарившейся CO₂ составляет (принимается): $n = 0,2$. Температура смеси жидкой и газообразной CO₂ определяется из уравнения баланса энергии:

$$r(T_1) \cdot n = \Delta h_{ж\ 1-2}(1 - n) - \Delta h_{газ\ 1-2} \cdot n, \quad (1)$$

где $r(T_1)$ – удельная теплота фазового перехода при температуре T_1 , Дж/кг; $\Delta h_{ж\ 1-2}$ – изменение энтальпии жидкости при переходе от температуры T_1 до температуры T_2 , Дж/кг; $\Delta h_{газ\ 1-2}$ – изменение энтальпии газа при переходе от температуры T_1 до температуры T_2 , Дж/кг.

Пренебрегая изменением теплоемкости вещества с температурой, изменение температуры смеси в процессе 1-2 определяется выражением:

$$\Delta T = \frac{r(T_1) \cdot n}{C_{p\ ж} (1 - n) + C_{p\ газ} \cdot n}, \quad (2)$$

где $C_{p\ ж}$ – удельная теплоемкость жидкости, Дж/кг·К; $C_{p\ газ}$ – удельная теплоемкость газа, Дж/кг·К.

Диаметр частиц дисперсной фазы на срезе насадка принимался равным 1 мм. Для сравнительных (оценочных) расчетов также задавался диаметр 0,1 [мм].

Граничные условия показаны на Рис.2. На входе в расчетную область со стороны насадка был задан расход $g = 28$ кг/с, суммарный для газовой (несущей) фазы и частиц (дисперсной фазы). Задание ГУ «Свободный выход» моделирует связь полости резервуара с атмосферой, обеспечивает как отток вещества, так и течение воздуха внутрь резервуара (при разряжении внутри). ГУ «Понтон» отличается от ГУ «Стенка» заданием условий прилипания для дисперсной фазы. Расчет проводился с заданием шага интегрирования через итерационный параметр в виде числа CFL=1, что обусловлено применением явной схемы численного решения. Также малая величина параметра шага препятствует численному сглаживанию поля переменных в зоне струи углекислого газа и позволяет получить подробную структуру течения в данной области.

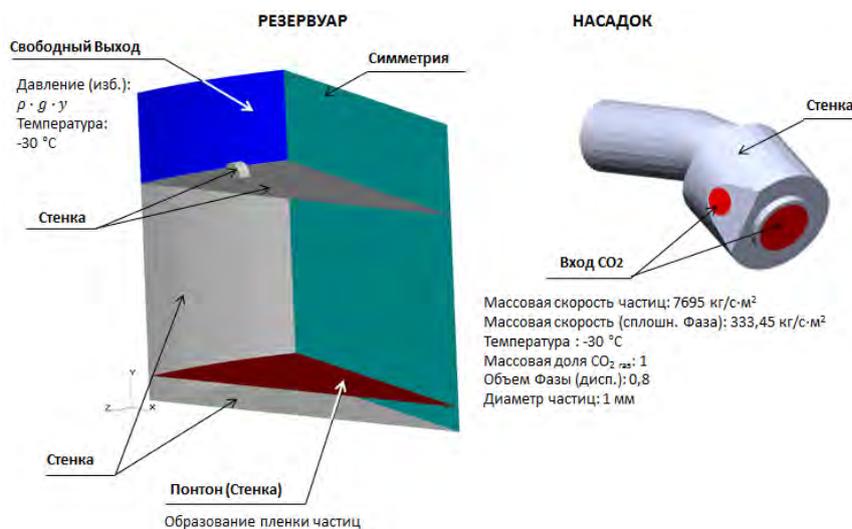


Рис.2 – Граничные условия

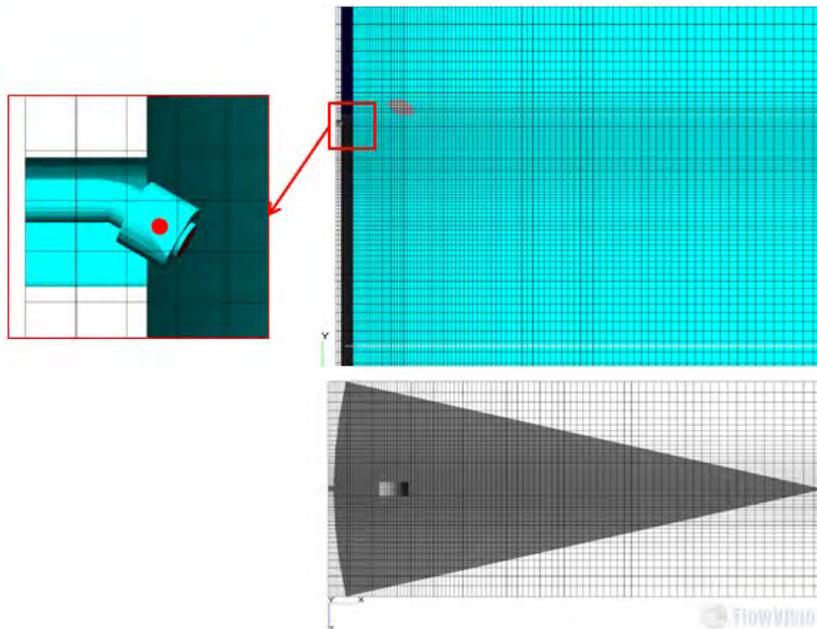


Рис.3 – Расчетная сетка

Использовалась неравномерная расчетная сетка с минимальным размером ячейки 0,1 м вблизи выхода насадка (см. Рис.3). Общее число расчетных ячеек составляет 264000. Такая сетка позволила провести расчет в течение 1 минуты физического времени подачи углекислоты в резервуар с шагом интегрирования CFL=1. При этом все необходимые динамические характеристики системы были получены за приемлемое время расчета задачи (~4 суток).

В результате расчета получено распределение давление в объеме резервуара, показанное на Рис.4 для различных диаметров частиц. Снижение давления на начальном участке кривой связано с интенсивным испарением углекислоты, приводящим к снижению температуры газовой смеси (показано на Рис.5). Интенсивность испарения напрямую зависит от площади испарения частиц, соответственно, диаметр частиц играет ключевую роль в изменении давления и достижении минимального значения. При более мелких частицах скорость снижения давления возрастает, что наблюдается при сравнении указанных графиков давления.

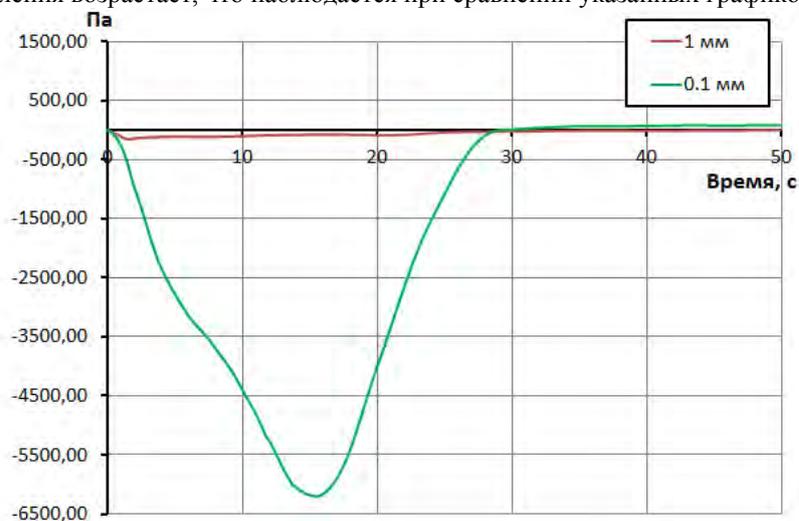


Рис.4 – Изменение среднего избыточного давления в объеме резервуара (область выпуска и подводящий патрубок насадка не учитывались) при различном диаметре частиц дисперсной фазы: $d=1,0$ мм и $d=0,1$ мм

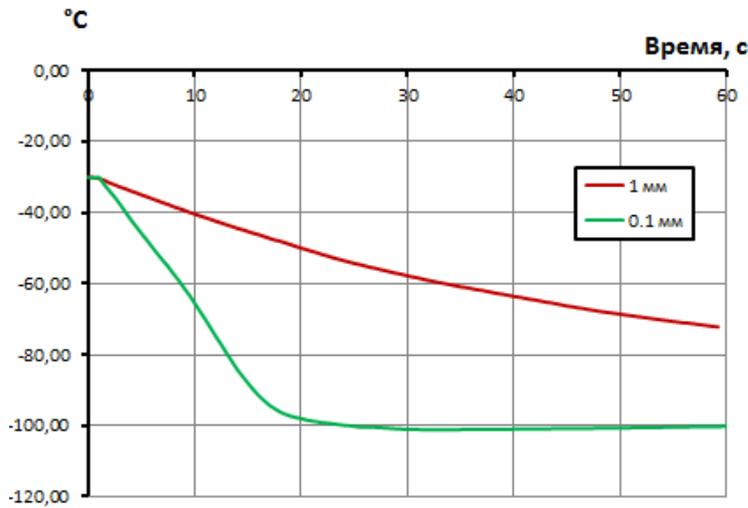


Рис.5 – Изменение средней температуры, [°C] в объеме резервуара (область выпуска и подводящий патрубок насадка не учитывались) при различном диаметре частиц дисперсной фазы: $d=1,0$ мм и $d=0,1$ мм

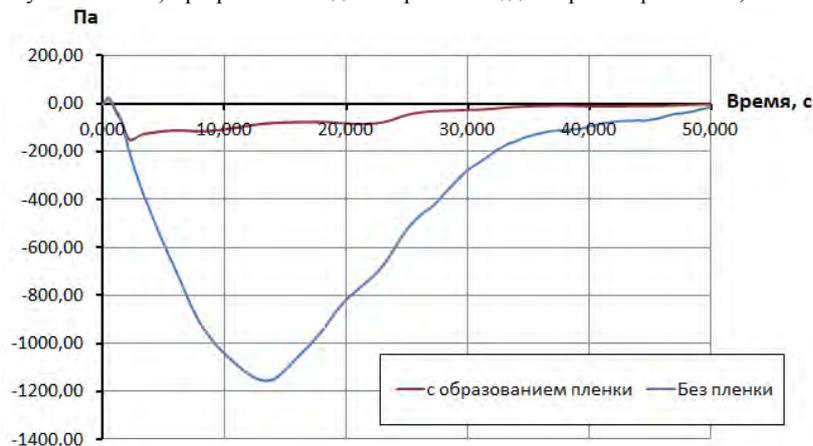


Рис.6 – Изменение избыточного давления в резервуаре, показано сравнение градиента давления с использованием различных граничных условий на понтоне (диаметр частиц 1 мм)

Повышение давления в резервуаре по времени связано с увеличением плотности газозвушной смеси, которое при дальнейшем поступлении углекислоты в резервуар превалирует над снижением давления за счет испарения. Образование пленки частиц углекислоты снижает скорость изменения давления, сравнительный график расчетных характеристик представлен на Рис.6.

Снижение температуры при фазовом переходе наблюдается локально в области формирования струи углекислого газа. По мере заполнения резервуара CO_2 низкая температура достигает крышки понтона и распространяется во всем объеме (см. Рис.7).

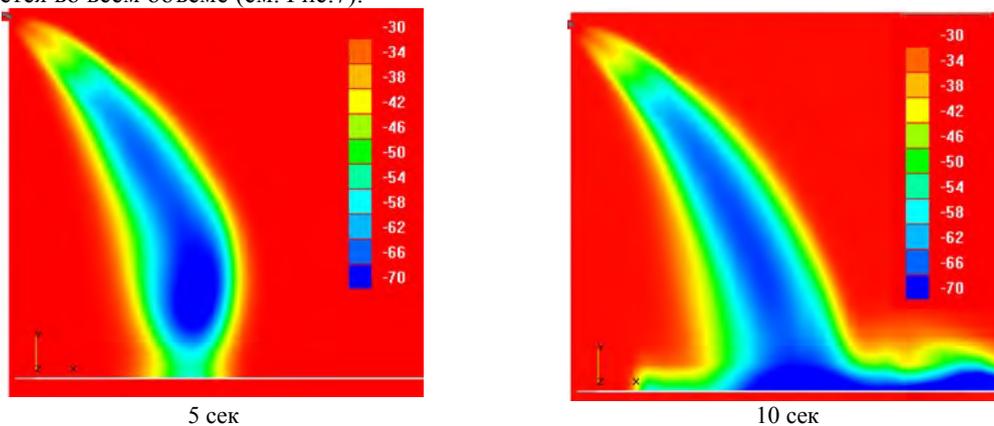


Рис.7 – Распределение температуры, °C в объеме резервуара в зависимости от времени

Исследование на содержание газовой фазы на насадке (при входе в расчетную область) показало, что оно не существенно влияет на интенсивность вакууммирования резервуара (см. Рис.8).

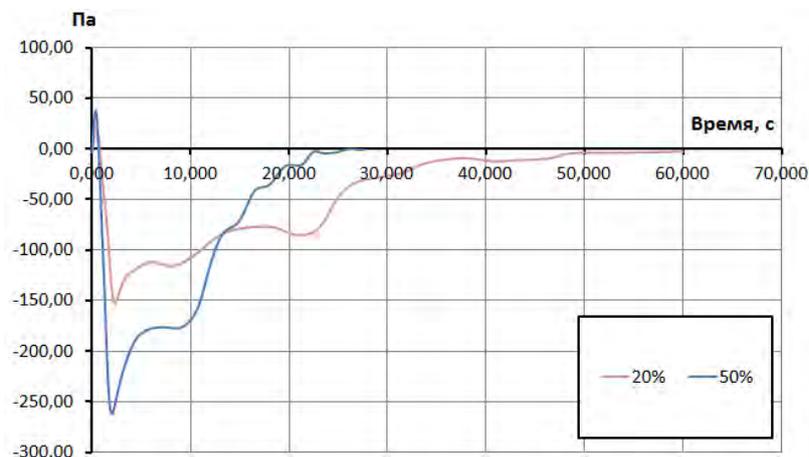


Рис.8 – Изменение избыточного давления в резервуаре при различном содержании газовой фазы (диаметр частиц 1 мм)

4. Выводы и рекомендации по применению

Учет фазового перехода «жидкость-пар» возможен в рамках применения Дисперсной фазы, разработанная методика позволяет использовать ее для расчета систем пожаротушения. При решении задачи моделирования с Дисперсной моделью имеется большое количество неизвестных параметров системы, подлежащих более точному определению. Качественная оценка чувствительности характеристик процесса от задаваемых параметров модели приведена на Рис.9.

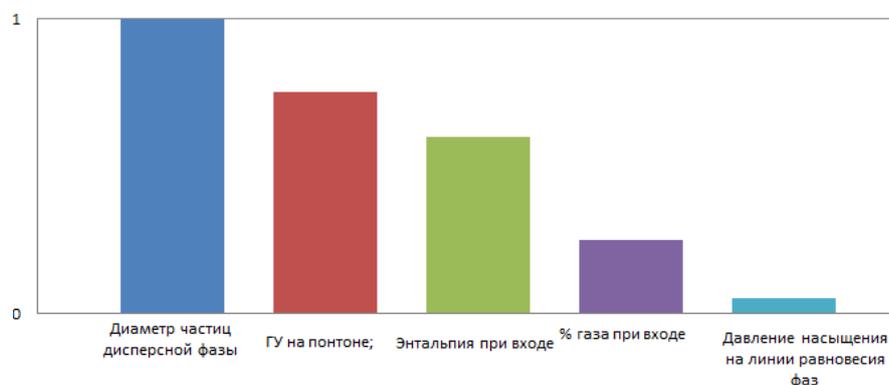


Рис.9 – Оценка влияния параметров модели на расчетные характеристики

Верификация разработанной модели возможна при проведении эксперимента на модельном стенде в виде резервуара малого объема, а также при точном определении расхода и состава фаз на подающем насадке.

Список литературы

1. FlowVision Руководство пользователя, Версия 3.09.01 – 2014.
2. NIST Chemistry WebBook – National Institute of Standard and Technology Standard Reference Database Number 69. – Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
3. Алтунин В.В. Теплофизические свойства двуокиси углерода. М., Издательство стандартов, 1975, с. 546