

УДК 615.47

Численное исследование процессов испарения и тепломассопереноса внутри форсунки каталитического риформера дизельного топлива*

**М.Ю. Хребтов¹, М.О. Жерибор^{1,2,3}, Р.И. Мулляджанов^{1,2},
Д.И. Потемкин³, П.В. Снытников³**

¹*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск*

²*Новосибирский государственный университет*

³*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск*

E-mail: weexov@ya.ru

В представленной работе методом прямого численного моделирования с использованием открытого пакета OpenFoam исследуется процесс тепломассопереноса внутри форсунки оригинальной конструкции для каталитического риформера дизельного топлива в режиме малых расходов. Основная цель при создании дизайна данной модели форсунки заключается в повышении скорости и полноты испарения топлива, а также в улучшении характеристик перемешивания дизельного топлива с перегретым водяным паром перед прохождением реакционной смеси через катализатор. Внутри форсунки располагаются две области, в которых создаются потоки с противоположными направлениями закрутки, что приводит к генерации сильного сдвига скорости внутри форсунки, интенсифицирующего процессы перемешивания. Расчеты проводились в эйлерово-лагранжевой постановке, с учетом процессов испарения капель топлива. Результаты расчетов показывают, что течение на выходе из сопла обладает хорошей однородностью состава смеси и обеспечивает высокую степень испарения топлива на ранних стадиях течения.

Ключевые слова: водородная энергетика, прямое численное моделирование, фазовые переходы, каталитический риформинг, дизельное топливо.

Введение

Растущие экологические требования к способам производства электроэнергии стимулируют создание новых методов ее генерации с уменьшением выбросов парниковых газов и вредных примесей. Альтернативой сжиганию углеводородов для выработки электроэнергии является применение электрохимических генераторов, позволяющих преобразовывать энергию химических связей в электричество с более высокой эффективностью по сравнению с электрогенераторами на основе традиционных двигателей

* Исследование выполнено за счет гранта РНФ № 19-19-00257, <https://rscf.ru/project/19-19-00257>. Модификация расчетного кода и построение численной модели выполнены в рамках государственного задания ИТ СО РАН.

внутреннего сгорания. Одной из главных проблем распространения водородных энергетических установок является их высокая стоимость и низкая доступность топлива для них. На сегодняшний день активно ведется разработка топливных процессоров — устройств, позволяющих преобразовывать в ходе каталитических процессов различное углеводородное сырье в синтез-газ (водородсодержащий газ) [1–8]. Такие устройства решают проблему транспортировки и хранения водорода, а также могут обеспечить постепенный переход от ископаемых к возобновляемым источникам энергии за счет использования синтетических топлив наряду с традиционными.

Одним из перспективных направлений является использование автотермического риформинга дизельного топлива: в реакторе топливо перемешивается с перегретым водяным паром и кислородом перед катализатором и далее происходит его каталитическое превращение в синтез-газ [4]. Преимущества дизельного топлива в данном процессе — это его высокая объемная энергетическая плотность, а также широко распространенная и общедоступная инфраструктура для работы с ним. В автотермических реакторах перед катализатором необходимо создать максимально однородную по составу смесь из всех входящих в нее компонентов, при этом топливо должно полностью испариться. Испарение топлива происходит за счет его взаимодействия с перегретым водяным паром, для чего необходимо обеспечить интенсивный теплообмен между каплями и паром. Требования к равномерности состава смеси здесь существенно более высокие, чем в топливных форсунках камер сгорания, так как каталитическая реакция эффективно протекает лишь в достаточно узком диапазоне параметров.

Для достижения указанных характеристик требуется проектирование новых типов форсунок, работающих при низких массовых расходах топлива, лимитированных скоростью протекания каталитической реакции и низкой мощностью устройств (0,1–10 кВт по электричеству). Большинство промышленных форсунок проектируется для высоких расходов топлива и обладает рядом особенностей, плохо масштабирующихся при уменьшении расхода. В то же время развитие аддитивных технологий позволяет создавать форсунки произвольных форм со сложной внутренней геометрией, что открывает новые возможности для проектирования. В связи с развитием доступных вычислительных мощностей численное моделирование процессов, протекающих внутри форсунки, становится все более распространенным при ее конструировании.

Авторами [1] была предложена конструкция автотермического риформера дизельного топлива и исследована его работа численным методом [2], однако такие аспекты, как однородность распыла топлива и его испарение, не изучались. Исследование эффективности распыла топлива для ряда риформеров [6–8] позволяет заключить, что в режимах с малым расходом топлива существует проблема при производстве центробежных форсунок с необходимым перепадом давления из-за очень маленьких размеров выходного сопла и высокой точности, обязательной для его изготовления. Альтернативным подходом является использование форсунок типа *airblast* [9], в которых атомизация происходит за счет воздействия на жидкость струи газовой фазы. Применительно к дизельным риформерам такие форсунки слабо исследованы.

В настоящей работе с помощью численного метода исследуется форсунка с аэродинамическим воздействием струи пара на поток дизельного топлива применительно к конструкции и параметрам работы предложенного ранее прототипа риформера [1]. Особенностью работы форсунки является использование двух путей подачи топлива и водяного пара с организацией интенсивного противовращения частей потока внутри

объема форсунки, приводящего к генерации интенсивных сдвиговых напряжений, усиливающих турбулентную диффузию, теплообмен и дробление капель топлива.

Геометрическая модель форсунки

В представленной работе для достижения равномерного распыла, испарения и перемешивания топлива предлагается модель форсунки с четырьмя подводщими каналами водяного пара, расположенными попарно в двух параллельных плоскостях. Данные каналы создают закрутку потока с взаимно противоположными знаками в двух областях, разделенных внутренней перегородкой (рис. 1). Такая конфигурация позволяет добиться высокой амплитуды поперечного сдвига, что ведет к генерации турбулентности, которая способствует увеличению эффективной диффузии и, как следствие, увеличению интенсивности перемешивания, дробления и испарения капель топлива внутри форсунки. Закрутка потока также удлиняет траектории частиц, тем самым увеличивая время нахождения капель жидкой фазы внутри форсунки, что усиливает процессы теплообмена и перемешивания компонент потока.

Форсунка состоит из двух кольцевых областей с тангенциально расположенными каналами подачи перегретого водяного пара (А и В на рис. 1) диаметром 1,2 мм, внутри которых размещены трубки подачи топлива диаметром 0,5 мм (отмечены зеленым цветом на рис. 1), а также острой кромки, разделяющей кольцевые каналы, центрального тела обтекания, области перемешивания и выходного сопла с поджатием.

Топливо подается внутри каналов подачи водяного пара, так как в них амплитуда скорости пара максимальна, что должно приводить к эффективному захвату капель потоком и их дроблению.

Тело обтекания используется для того, чтобы стабилизировать область рециркуляции внутри форсунки путем уменьшения низкочастотных колебаний в этой области и направить потоки из двух кольцевых каналов параллельно друг другу. Острая кромка обеспечивает столкновение двух частей потока с противоположным знаком закрутки. За кромкой образуется область с интенсивным сдвигом. При прохождении через нее капля последние подвергаются воздействию потока с противовращением, что усиливает тепло- и массообмен между фазами, а также общее перемешивание потока.

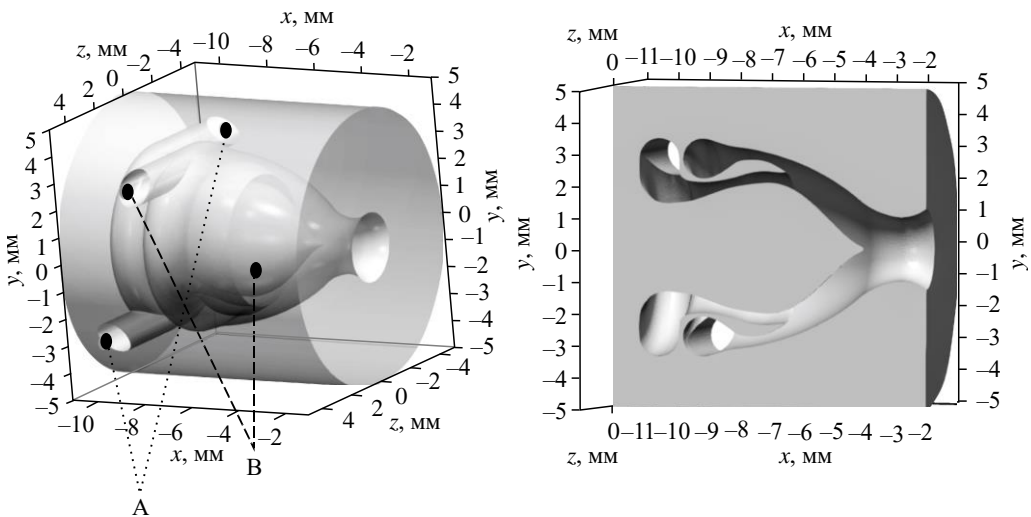


Рис. 1. Конструкция форсунки (слева) и организация внутреннего объема форсунки (справа).
Буквами А и В обозначены подводщие каналы для водяного пара;
черные точки — выходные сечения трубок подачи топлива.

Выходное сопло с поджатием интенсифицирует взаимодействие спиральных вихрей, образующихся внутри форсунки, что приводит к ускорению развития неустойчивостей и усилению турбулентной диффузии в зоне за критическим сечением сопла, несмотря на небольшие значения числа Рейнольдса в потоке в режиме с малым расходом топлива. Использование предложенной системы каналов подачи водяного пара позволяет варьировать соотношение между частями потока, вращающимися в противоположные стороны, для получения различных режимов течения.

Следует указать, что желательно, чтобы течение после выхода из сопла не содержало сильной зоны рециркуляции, тогда смесь при выходе из сопла будет распределяться максимально равномерно по сечению канала. Сильная закрутка одного знака (без противозакрутки) способствует формированию устойчивой зоны рециркуляции и интенсивному возвратному течению вблизи оси за выходом из сопла. Наличие закрутки противоположного знака приводит к формированию центральной струи, подавляющей центральную зону рециркуляции.

Детали расчета

Исследование характеристик форсунки проводилось путем численного моделирования при помощи открытого пакета OpenFOAM 7 (www.openfoam.com) [10] с использованием стандартного решателя для расчета распыла частиц sprayFoam (ранее называвшегося dieselFoam). Указанный решатель, предназначенный для расчетов распыла частиц в эйлерово-лагранжевой постановке, независимо валидировался несколькими расчетными группами для разных задач. В работе [11] было выполнено сравнение результатов расчетов эволюции струи паровой фазы, полученной после испарения лагранжевых частиц, с данными аналитического выражения из исследования [12], которое показало хорошее согласование. В работах [13, 14] проводилась валидация данных, полученных с помощью лагранжево-эйлерова решателя OpenFoam, с результатами экспериментов для процесса распыла и испарения дизельного топлива. Сопоставление данных эволюции жидкой и паровой фаз, полученных в расчетах и эксперименте, показало неплохое согласование. В работах [15, 16] была выполнена валидация данных, полученных с помощью решателя, с экспериментальными результатами для распыла и испарения капель этанола и воды. В работе [17] проводилась валидация данных, полученных с использованием решателя OpenFoam, с экспериментальными данными для задачи взаимодействия ударной волны в газе с облаком водяных капель. Результаты показали хорошее совпадение.

Предложенная конфигурация форсунки была смоделирована в эйлерово-лагранжевом представлении. Капли топлива моделировались лагранжевыми частицами, а газовая фаза (смесь водяного пара и паров дизельного топлива) — методом конечных объемов на фиксированной расчетной сетке. В качестве модельного соединения для топлива использовался *n*-гептан (C_7H_{16}), цетановое число которого сопоставимо с цетановым числом дизельного топлива. Его физические свойства задавались из базы данных NIST (www.webbook.nist.gov/chemistry/fluid/). *n*-гептан был выбран из-за наличия валидированной модели его физических свойств в составе OpenFoam и широкого использования его в качестве суррогатного топлива в численном моделировании [18]. Следует отметить, что *n*-гептан обладает более низкой плотностью и более низкой температурой кипения по сравнению с реальным дизельным топливом. Среди алканов ближе к реальным характеристикам дизельного топлива находится гексадекан. Гексадекан и гептан имеют одинаковую удельную теплоту испарения (~ 300 кДж/кг), однако гексадекан обладает

на 30 % большим коэффициентом поверхностного натяжения, поэтому при переходе к гексадекану можно ожидать увеличения на ~30 % равновесного диаметра капель.

Моделирование проводилось с учетом переменных плотности и температуры. Характеристики смеси определялись как средневзвешенные в зависимости от массовой доли содержания компонент смеси. Рассчитывалась эволюция двух эйлеровых компонент смеси: перегретый водяной пар и пары дизельного топлива (пары гептана), а также эволюция лагранжевых частиц (капли гептана).

Для эйлеровой фазы разрешались следующие модельные уравнения:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right) \right] - \nabla \left(\mu \frac{2}{3} \text{tr}(\nabla \vec{u}) \right) + S_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h_s) = \nabla \cdot (a \nabla h_s) + \frac{Dp}{Dt} + S_h, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = \nabla \cdot (\mu_i \nabla Y_i) + S_{Y_i}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_{ev}, \quad (4)$$

где (1) — уравнение баланса импульса сплошной среды, в котором \vec{u} — скорость смеси, ρ — плотность смеси ($\rho = \rho_{\text{H}_2\text{O}} Y_{\text{H}_2\text{O}} + \rho_{\text{C}_7\text{H}_{16}} Y_{\text{C}_7\text{H}_{16}}$), p — давление газа, m — динамическая вязкость смеси ($\mu = \mu_{\text{H}_2\text{O}} Y_{\text{H}_2\text{O}} + \mu_{\text{C}_7\text{H}_{16}} Y_{\text{C}_7\text{H}_{16}}$). Уравнение (2) определяет баланс энтальпии, здесь h_s — удельная энтальпия, a — коэффициент теплопроводности смеси. Уравнение (3) определяет баланс массовых долей компонент смеси (водяного пара $Y_{\text{H}_2\text{O}}$ и паров дизельного топлива $Y_{\text{C}_7\text{H}_{16}}$). Уравнение (4) — уравнение неразрывности. В правых частях уравнений (1)–(4) находятся источники/стоки (S_m , S_h , S_Y , S_{ev} , где S_m — источник импульса за счет сил трения, S_h — источник энтальпии, S_Y — источник данной компоненты смеси, S_{ev} — изменение плотности за счет испарения), связанные с взаимодействием с лагранжевой фазой (каплями топлива). Локальные характеристики смеси определялись как средневзвешенные характеристики компонент смеси в данной точке.

Модель турбулентности ввиду малых чисел Рейнольдса для решения уравнений не использовалась. Для дискретизации пространственных производных применялись центрально-разностные схемы (второй порядок точности), для производных по времени использовалась неявная схема Кранка–Николсона (второй порядок точности). Взаимодействие турбулентности с каплями рассчитывалось напрямую, так как в расчете разрешался весь спектр пульсаций скорости.

Для жидкой фазы каждая расчетная лагранжева частица моделировала одну сферическую каплю, для которой записывалось следующее эволюционное уравнение движения:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{\vec{F}_D + \vec{F}_P}{m_p}, \quad (5)$$

где F_D и F_P — силы сопротивления потока и воздействия градиента давления в газе на каплю, u_p — скорость капли, m_p — масса капли. Сила сопротивления определялась как

$$\vec{F}_D = m_p \frac{18\mu}{\rho_p d^2} \frac{C_D \text{Re}_p}{24} \vec{u}_{\text{rel}}, \quad (6)$$

где u_{rel} — скорость газа в системе отсчета капли, μ — динамическая вязкость газа, ρ_p — плотность жидкой фазы, d — диаметр капли, C_D — коэффициент сопротивления, Re_p — локальное число Рейнольдса для капли. Коэффициент сопротивления для сферической капли задавался в виде [19]:

$$C_D = \begin{cases} 24(1 + 0,15 Re_p^{0,687}), & Re_p \leq 1000, \\ 0,44, & Re_p > 1000. \end{cases} \quad (7)$$

Воздействие градиента давления в газе на каплю рассчитывалось как

$$\bar{F}_P = \frac{1}{6} \pi d^2 \bar{\nabla} P. \quad (8)$$

Изменение массы капли за счет испарения учитывалось с использованием модели Ранца–Маршалла [20] для числа Шервуда следующим образом:

$$\frac{dm_p}{dt} = -\pi d \left(2 + 0,6 Re_p^{1/2} Sc^{1/3} \right) D_{\text{vap}} (\rho_{\text{sat}} - \rho_{\text{inf}}), \quad (9)$$

где Sc — число Шмидта для паров топлива ($Sc \approx 2,3$ для паров гептана в перегретом водяном паре вблизи точки кипения гептана, согласно расчету по кинетической теории Чепмена–Энскога [21]), D_{vap} — коэффициент диффузии паров топлива (задающийся через плотность и динамическую вязкость газовой фазы в расчетной ячейке и число Шмидта для паров топлива: $\mu/(\varphi \cdot Sc)$), ρ_{sat} — плотность насыщенных паров на поверхности капли, ρ_{inf} — плотность паров топлива в данной расчетной ячейке.

Тепловой баланс для капли рассчитывался также с использованием модели Ранца–Маршалла [20], но для числа Нуссельта $Nu = 2 + 0,6 Re^{1/2} Pr^{1/3}$, и записывался в виде:

$$mc_p \frac{dT_p}{dt} = A \left(\frac{\kappa Nu}{d_p} (T - T_p) \right) - \dot{m}_p h_w, \quad (15)$$

где c_p — удельная теплоемкость капли, T_p — температура капли, A — площадь поверхности капли, T — температура газа в расчетной ячейке, содержащей каплю, h_w — удельная энтальпия фазового перехода.

Между эйлеровой и лагранжовой фазами рассчитывался двусторонний обмен импульсом (трение), теплом и веществом (испарение).

Распределение расхода водяного пара между внутренней (каналы А на рис. 1) и внешней (каналы В на рис. 1) парами каналов задавалось через условие постоянства среднего по сечению давления на входных отверстиях всех подводящих каналов. При этом суммарный расход водяного пара фиксировался равным 350 г/час. В данном случае полный расход пара за счет различного сопротивления каналов распределялся в соотношениях 1 (пара каналов А) к 1,8 (пара каналов В), что приводило к среднерасходным скоростям 50 и 90 м/с в каналах А и В соответственно. Выходная среднерасходная скорость при этом составляла $U_0 = 100$ м/с в критическом сечении сопла. Числа Рейнольдса на входе были равны 780 и 1400 (каналы А и В соответственно), выходное число Рейнольдса, построенное по критическому сечению сопла, равнялось 1600. Входной диаметр трубок составлял $D_0 = 1,2$ мм. Диаметр критического сечения сопла — 2 мм.

Температура входящего водяного пара задавалась равной 450 °С. На выходной границе расчетной области задавались конвективные граничные условия с фиксированным статическим давлением, равным атмосферному. На стенках задавались условия прилипания. Стенки предполагались адиабатическими (тепловой поток через стенку отсутствовал).

Процесс первичной атонизации топлива не моделировался. Инжекция топлива моделировалась монодисперсным потоком капель. Размер капель задавался равным 100 мкм, что соответствует числу Вебера, равному 12, для скорости 90 м/с. Указанное число Вебера близко к критическому при распаде жидкой струи в потоке газа [22]. Полный расход топлива составлял 150 г/ч, топливо инжектировалось с одинаковым расходом на входе всех четырех подводящих каналов (расход топлива в каналах был одинаков — 37,4 г/ч) через трубки диаметром 0,5 мм, расположенные на оси подводящих каналов водяного пара (рис. 1). Начальная температура жидкого топлива задавалась равной 20 °С. Теплоемкость жидкости и удельная теплота фазового перехода считались постоянными, и их значения были выбраны из таблиц для гептана.

Внутренние стенки форсунки должны быть прогреты водяным паром для обеспечения эффективного испарения капель. При увеличении температуры стенки выше точки Лейденфроста для малых чисел Вебера (< 65) в результате взаимодействия капель со стенкой, представляющего собой упругий отскок [23], пленка не образуется. Для п-гептана точка Лейденфроста на гладкой стенке соответствует температуре 180 °С [24]. При температуре водяного пара 450 °С температура стенок внутренней части сопла везде будет превышать температуру Лейденфроста. При этом для исследуемого диаметра капель — 100 мкм — число Вебера внутри форсунки оказывается низким (< 20). Исходя из этих двух факторов, в качестве модели взаимодействия капель со стенкой был выбран упругий отскок.

Расчетная область (рис. 2) представляла собой саму форсунку с выходным отверстием, соединенным с конусом, имитирующим начальную часть рабочего участка дизельного риформера, с углом раствора 30°. Поскольку число Рейнольдса в исследуемом течении предполагалось небольшим ($Re \sim 1600$), расчет возможно было провести с разрешением всех масштабов течения. Для обеспечения значения $y_+ = 1$ на стенке в критическом сечении сопла необходимая толщина пристенной ячейки сетки должна составлять $\sim 0,01$ мм. С учетом этого условия для первого узла на стенке была проверена сеточная сходимость решений на сетках с различным разрешением внутри области. На рис. 2с и 2d показаны сетки с разрешением 3 и 7 млн ячеек соответственно.

Сравнение средних полей скорости, а также распределения пульсаций окружной и продольной компонент скорости в критическом сечении сопла, полученные для этих двух сеток, приведены на рис. 3. Видно, что для указанных сеток результаты как по средним полям, так и по пульсациям очень близки друг к другу, что свидетельствует о достижении сеточной сходимости. Для всех результатов, приведенных ниже, использовалась сетка с 7 млн ячеек. Шаг по времени в расчете был фиксированным и составлял $1,5 \cdot 10^{-8}$ с.

В представлении результатов используется разложение мгновенной скорости (u_i) на среднюю по времени (U_i) и пульсационную (u_i'): $u_i = U_i + u_i'$. В обозначениях присутствуют две координатные системы: декартова (x, y, z), в которой проводился расчет, и цилиндрическая (x, r, φ), удобная для представления средних полей. Координаты в системах связаны как $y = r \cdot \sin(\varphi)$, $z = r \cdot \cos(\varphi)$. Для обезразмеривания результатов

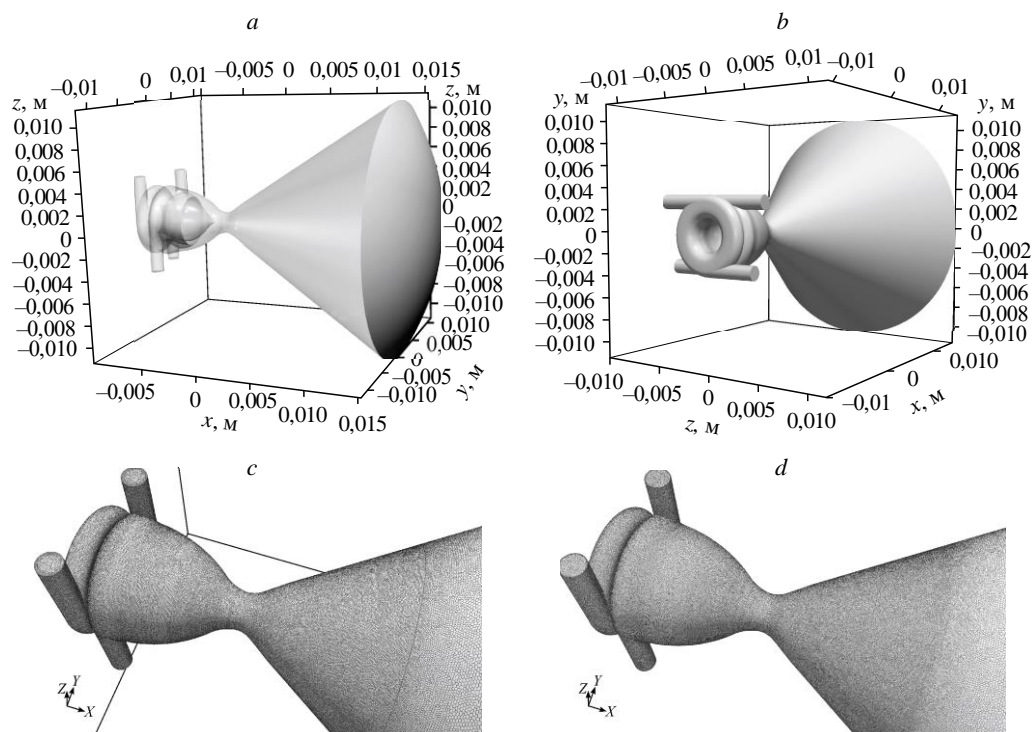


Рис. 2. Расчетная область (a, b), фрагмент расчетной сетки, содержащей 3 млн ячеек (c), фрагмент расчетной сетки, содержащей 7 млн ячеек (d).

использовались средняя скорость в критическом сечении $U_0 = 100$ м/с и диаметр критического сечения $D_0 = 2$ мм. Фигурные скобки обозначают осреднение по времени. Период осреднения составлял 0,01 с (или в безразмерных единицах $500 \cdot D_0 / U_0$), начиная от времени установления течения внутри сопла (время от начала расчета составляло $\sim 0,002$ с или $100 \cdot D_0 / U_0$).

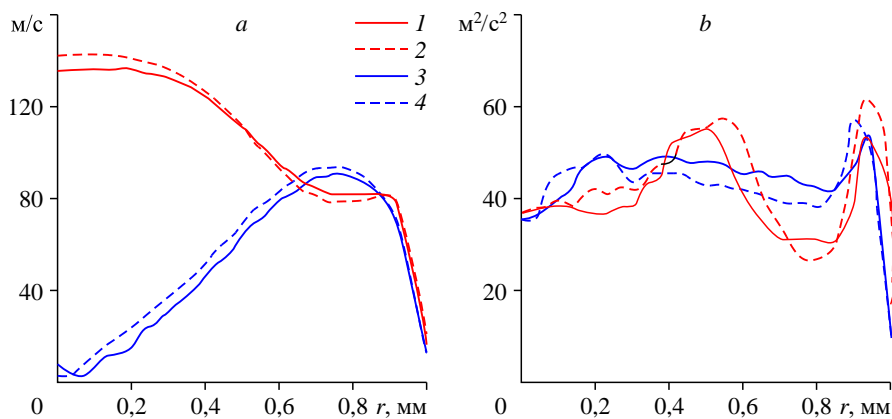


Рис. 3. Сравнение в критическом сечении сопла ($x = -1,5$ мм) средних полей продольной и окружной компонент скорости (a), а также вторых моментов пульсаций скорости (b) для сеток с 3 и 7 млн ячеек.
a: 1 — $\langle U_x \rangle$, 7 млн ячеек; 2 — $\langle U_x \rangle$, 3 млн ячеек; 3 — $\langle U_\phi \rangle$, 7 млн ячеек; 4 — $\langle U_\phi \rangle$, 3 млн ячеек;
b: 1 — $\langle u'_x u'_x \rangle$, 7 млн ячеек; 2 — $\langle u'_x u'_x \rangle$, 3 млн ячеек; 3 — $\langle u'_\phi u'_\phi \rangle$, 7 млн ячеек;
4 — $\langle u'_\phi u'_\phi \rangle$, 3 млн ячеек.

Результаты расчетов

Средние сдвиговые напряжения, а также мгновенные распределения амплитуды завихренности приведены на рис. 4. Видно, что внутри форсунки, там, где происходит смешение струй с разным знаком закрутки, сдвиг окружной скорости является максимальным. При этом вблизи оси сопла амплитуды сдвига окружной и продольной компонент скорости сравниваются между собой. В этой области сдвиг продольной скорости сконцентрирован ближе к периферии сопла, а сдвиг окружной скорости максимален ближе к его оси. Аналогичную картину можно наблюдать по распределению мгновенной амплитуды завихренности (рис. 4с). Внутри форсунки в области смешения струй присутствуют когерентные вихревые структуры в виде спиральных вихревых трубок. Они формируются между слоями с противоположным направлением закрутки и спирально накручиваются на центральное тело обтекания. В области сужения сопла эти вихревые трубки смыкаются и образуют двойную спиральную структуру, которая на выходе из сопла приводит к неустойчивому распаду вихря без образования сильной центральной

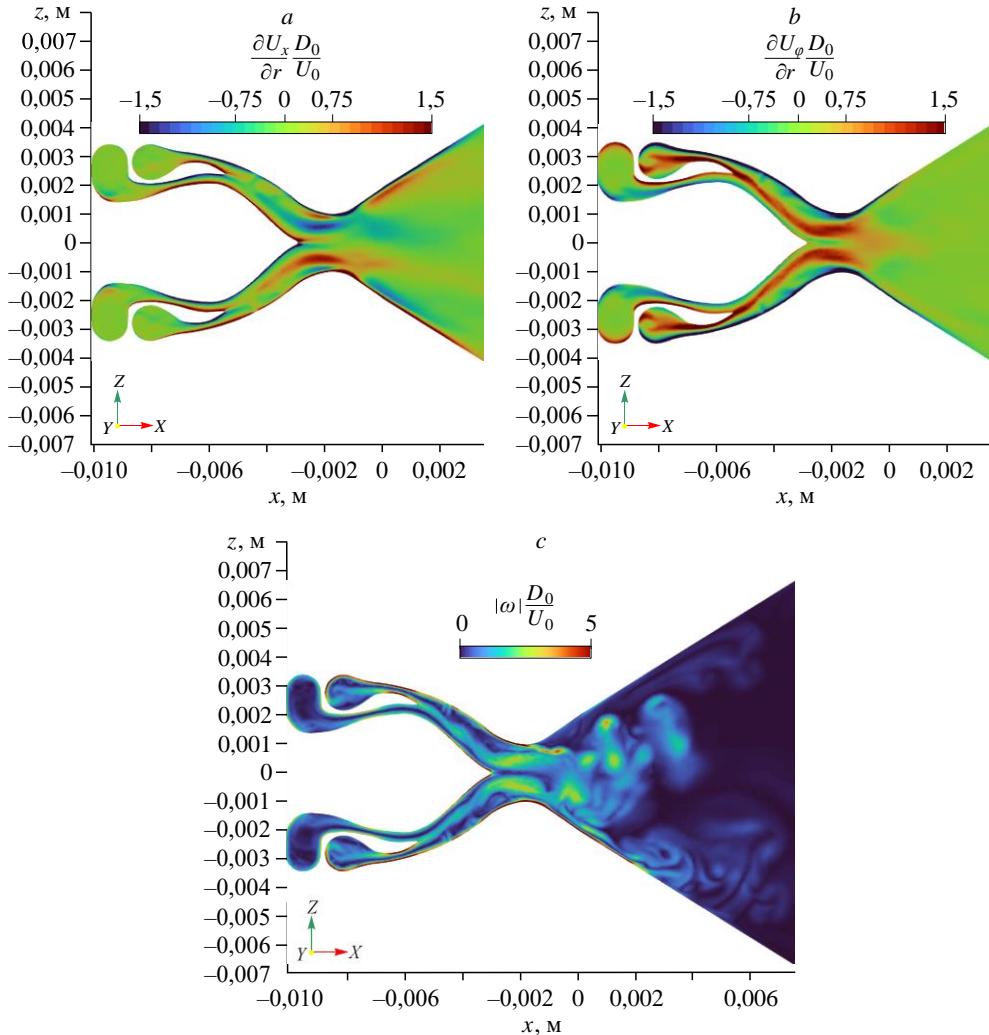


Рис. 4. Средние радиальные сдвиги продольной компоненты скорости (а) и окружной компоненты скорости (b), мгновенное распределение амплитуды завихренности в продольном сечении форсунки (с).

зоны рециркуляции в среднем течении. Распад вихря порождает интенсивные хаотические пульсации в поле скорости.

Распределения средних по времени компонент скорости, а также ее среднеквадратичных отклонений в продольном сечении потока приведены на рис. 5. Видно, что внутри сопла пульсации всех компонент скорости малы, среднеквадратичные отклонения не превышают 10 % от амплитуды средней скорости. Генерация пульсаций связана здесь с нестационарным взаимодействием спиральных вихревых трубок в области смешения струй с противовращением. Внутри сопла максимальную интенсивность имеют пульсации окружной скорости.

На выходе из сопла пульсации возрастают и достигают максимума на расстоянии 1–2 калибров от выходного сечения сопла вниз по потоку. Среднеквадратичные отклонения скорости при этом возрастают и доходят до 45 % от средней скорости в том же сечении. В этой области продольные пульсации являются наибольшими, их максимум расположен на оси сопла.

Структура течения в области внутри форсунки имеет закрутку положительного знака. Указанная область находится снаружи области с отрицательным знаком закрутки. Из-за большей скорости внешней струи (исходящей из каналов В, рис. 1) окружная скорость внутренней струи до точки смешения струй меньше внешней примерно в 1,5 раза. При смешении струй часть окружной скорости взаимно компенсируется (с образованием спиральных вихревых структур) и дисбаланс в окружных скоростях струй усиливается.

На выходе из сопла внутренняя струя остается незакрученной, при этом продольная скорость в ней максимальна, что препятствует формированию центральной зоны рециркуляции в данной зоне.

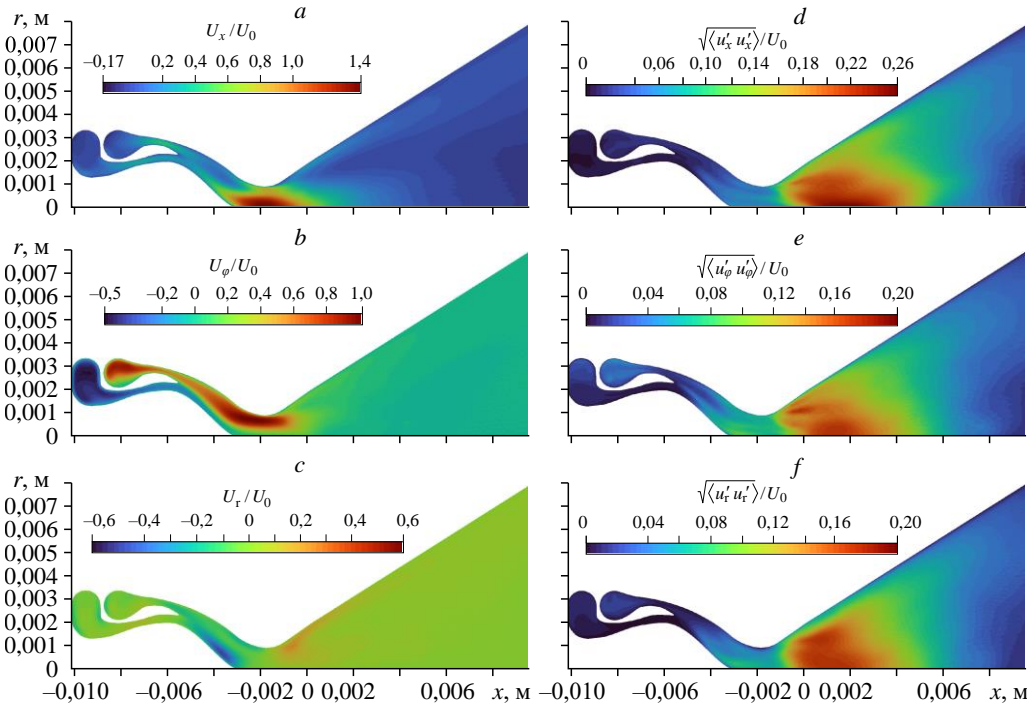


Рис. 5. Распределение средних по времени продольной (а), окружной (б) и радиальной (с) компонент скорости в продольном сечении

и распределение среднеквадратичных отклонений соответствующих компонент скорости (d–f).

Распределения скоростей в критическом сечении сопла ($x = -1,5$ мм), а также за и перед ним приведены на рис. 6. Видно, что продольная скорость внутри сопла имеет два максимума, которые связаны с двумя струями, при этом центральный максимум, соответствующий внутренней струе, в несколько раз больше наружного. Окружная скорость ведет себя противоположным образом — она почти полностью сконцентрирована во внешней струе. На выходе из сопла продольная компонента скорости имеет максимум по центру, связанный с внутренней струей, и область меньшей скорости на периферии, связанную с внешней струей. После выхода из сопла течение расширяется, в продольной скорости наблюдается второй максимум, который обусловлен частичным прилипанием струи к стенке.

В распределении окружной скорости видно, что закрутка имеет один знак на выходе из сопла и отношение интеграла окружной скорости к интегралу продольной скорости по площади критического сечения соответствует $\sim 0,5$. Из-за расширения потока окружная скорость уменьшается на выходе из сопла, и здесь можно отметить два максимума окружной скорости, что свидетельствует о двойной спиральной структуре течения, состоящей из внутренней спирали с низкой закруткой по центру и более медленной спирали в пристенной области с большей относительной закруткой.

В распределении радиальной скорости видно движение с обтеканием геометрии, а также наличие двух струй внутри сопла. Профили пульсаций среднеквадратичных отклонений скорости (рис. 6d–6f) имеют достаточно однородную структуру по всему сечению сопла с плавным затуханием к стенке. За выходом из сопла интенсивность пульсационной компоненты скорости существенно возрастает. При этом максимальная

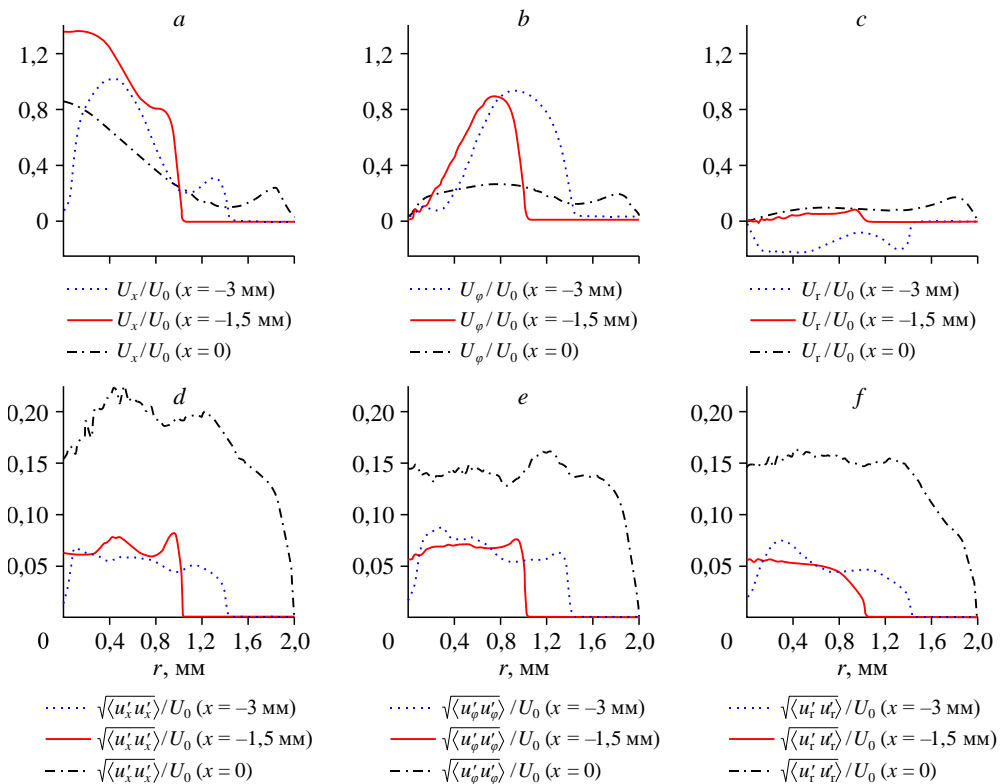


Рис. 6. Профили компонент средней скорости (a–c) и их среднеквадратичных отклонений (d–f) в радиальных сечениях.

интенсивность пульсаций продольной скорости за выходом из сопла (рис. 6d) в 1,4 раз выше максимумов пульсаций радиальной и окружной компонент скорости (рис. 6e, 6f).

Аналогичные выводы можно сделать по распределению мгновенных скоростей (рис. 7). Видно, что внутри сопла течение практически стационарно. Но на выходе из него можно видеть интенсивный распад двойной спиральной структуры вихря с проявлением сильной стохастической компоненты потока.

В распределении температуры (рис 7d) видно, что испарение происходит более интенсивно во внутреннем контуре, так как последний имеет большую длину и большее соотношение топлива к водяному пару. Тут же можно видеть и большую массовую долю испарившегося топлива (рис. 7e), хотя степень его испарения здесь меньше, чем во внешнем контуре. В распределении давления видно, что основной перепад давления внутри форсунки до выхода из сопла связан с действием центробежной силы и составляет ~ 3000 Па.

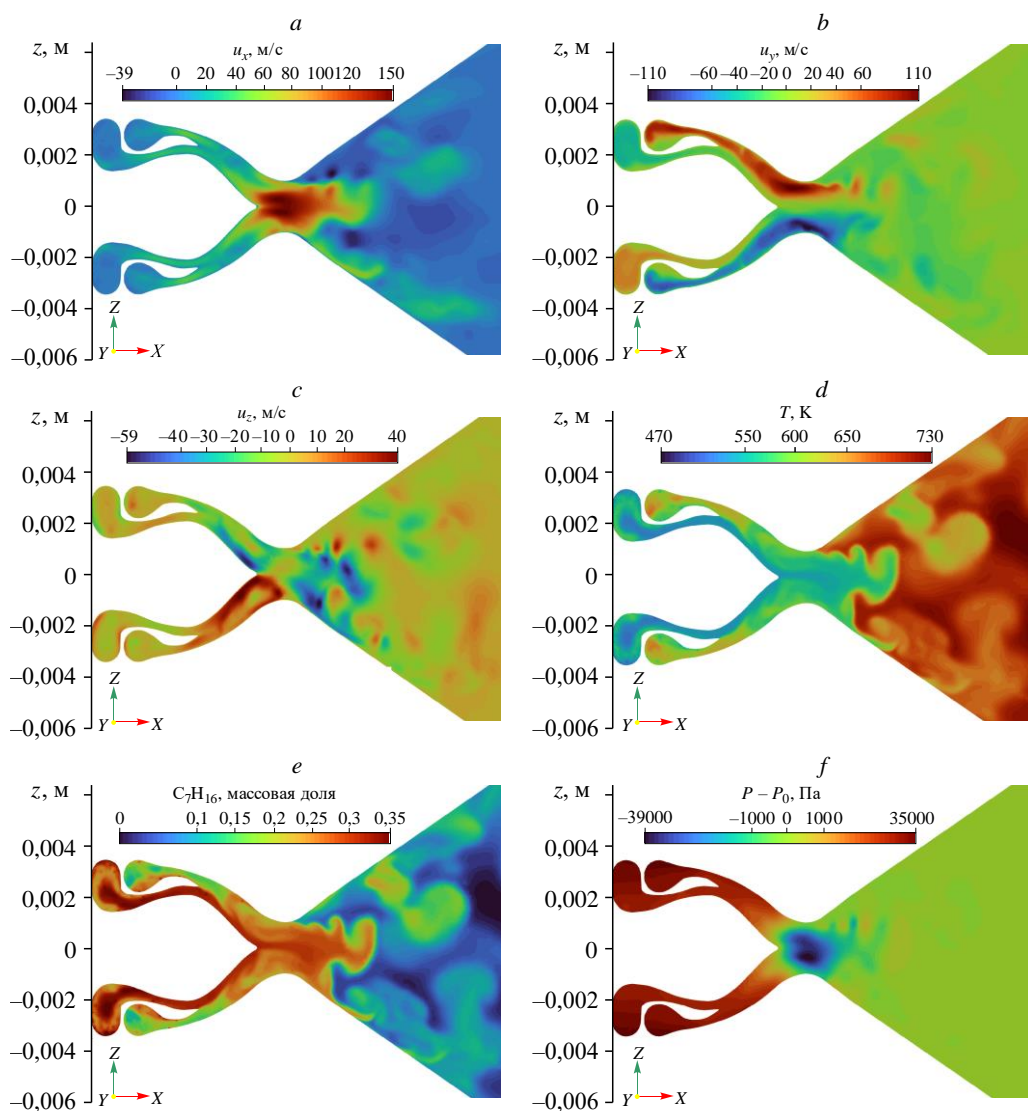


Рис. 7. Распределение мгновенных компонент скорости (a–c), температуры (d), массовой доли паров топлива (e) и избытка давления (f) в продольном сечении потока в момент времени $t = 0,01$ с.

На выходе из сопла наблюдается минимум давления, связанный с ускорением потока и действием центробежной силы. Дополнительное падение давления на оси сопла, вызванное влиянием центробежной силы, является недостаточным для появления устойчивой центральной зоны рециркуляции после критического сечения.

На рис. 8а представлена вихревая структура потока, визуализированная с помощью изоповерхности Q -критерия. Видно, что внутри сопла при смешении потоков с противовращением вследствие сворачивания слоя смешения образуется набор устойчивых спиральных вихрей. Количество вихрей варьируется во времени между 5 и 7, периодически они объединяются и разделяются между собой, за счет чего возникают пульсации скорости внутри сопла. Происходит стохастическое перезамыкание вихревых трубок. Также эта вихревая структура присутствует и в распределении паров топлива (рис. 8b). Здесь видно, что между вихрями испарение происходит более быстро. Это является следствием того, что плотные капли выталкиваются из центров вихрей силой инерции. Картина линий тока (рис. 8с) показывает, что струя после выхода из сопла распространяется в достаточно широком угловом секторе с присутствием в нем интенсивных пульсаций скорости, образующихся за счет неустойчивого распада вихря.

Среднее распределение массовой доли паров топлива приведено на рис. 9. В данном случае однородная смесь паров топлива и воды не занимает всю дальнюю область потока из-за того, что еще не прошло достаточного количества времени с начала расчета (расчет начинается с заполнения объема водяным паром). Тем не менее внутри сопла распределение уже является стационарным и не меняется. Период осреднения составлял 0,01 с (или в безразмерных единицах $500 \cdot D_0 / U_0$), начиная от времени установления

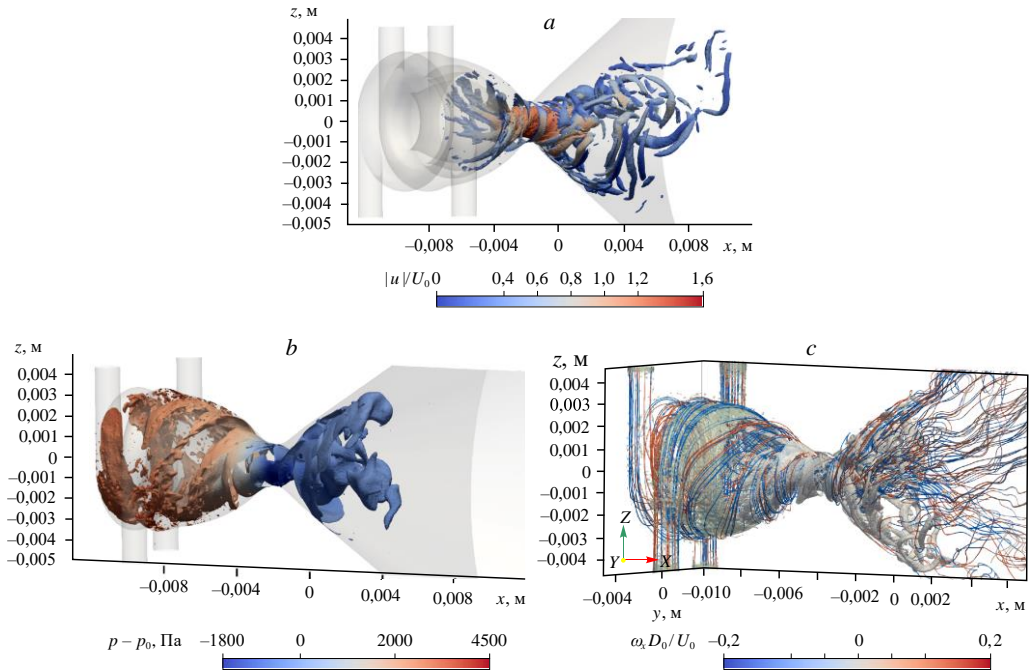


Рис. 8. Изоповерхность Q -критерия ($Q = 10^9$, цветом показана амплитуда мгновенной скорости) (а) и мгновенной массовой доли испарившегося топлива ($Y = 0,22$, цветом показан избыток давления) (b), а также линии тока, наложенные на изоповерхность Q -критерия (цветом обозначен знак продольной компоненты завихренности) (d) в момент времени $t = 0,01$ с.

течения внутри сопла. Из-за большой разницы во временных масштабах течения внутри и вне сопла установление полной стационарности распределения во всем объеме потребовало бы слишком больших вычислительных затрат ($\sim 0,1$ с или $7 \cdot 10^6$ шагов по времени).

Распределение средней массовой доли паров топлива в критическом сечении, а также в сечениях за и перед ним приведены на рис. 9*b*. Видно, что в критическом сечении ($x = -1,5$ мм) средняя массовая концентрация паров топлива составляет примерно 0,22, при этом полное испарение приводило бы к средней концентрации паров, равной 0,3. Таким образом, можно утверждать, что к моменту прохождения потоком выходного сечения сопла в нем испарилось ~ 73 % топлива. Мгновенные положения капель показаны на рис 9*c*. Видно, что большая их часть находится внутри сопла и лишь незначительная часть капель заметного размера вылетает из него. Таким образом, большая часть жидкости испаряется внутри сопла, что свидетельствует об эффективности предложенного варианта форсунки.

Распределения диаметра и массы капель по времени, прошедшему от момента их инжекции, приведены на рис. 10. Видно, что распределения имеют двухмодовую структуру, что указывает на разные скорости протекания процессов теплообмена и испарения в двух каналах подачи водяного пара. При этом более быстрое испарение капель наблюдается во внешнем канале, где соотношение жидкого топлива с водяным паром меньше, чем во внутреннем канале, что приводит к большей скорости испарения. Помимо того, что во внешнем канале (канал В на рис. 1) меньше начальная относительная концентрация топлива, там же наблюдается и большая скорость газа, что увеличивает интенсивность тепломассообмена между каплями и внешним потоком. На рис. 10*d* показано

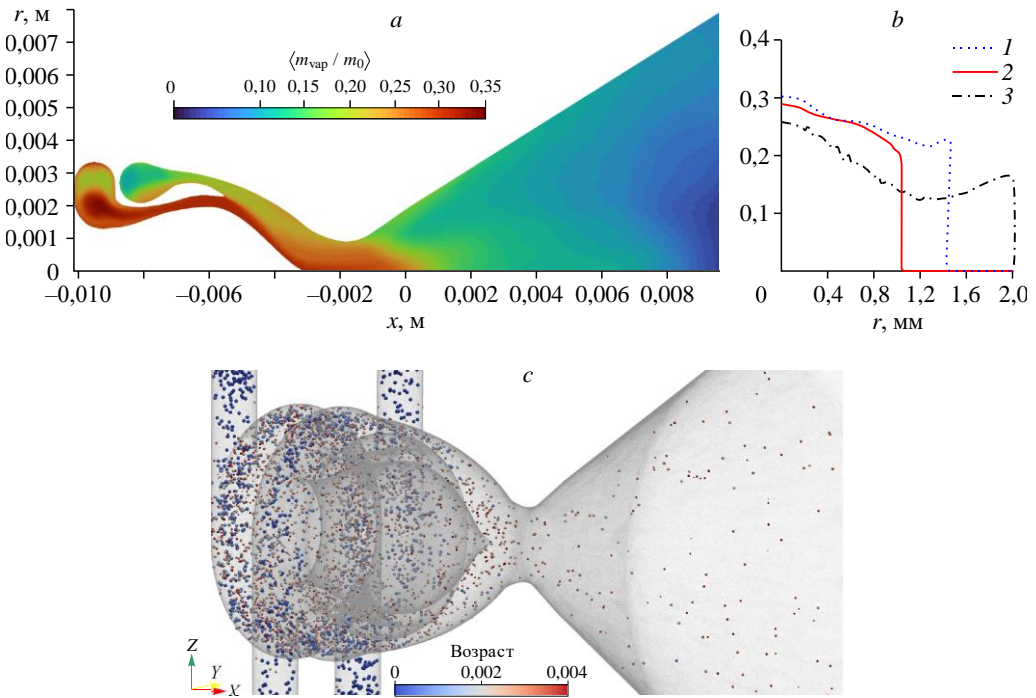


Рис. 9. Распределение массовой доли паров топлива в продольном сечении потока (а) и радиальные профили этого распределения (b) с осреднением за 0,01 с, а также мгновенное распределение капель топлива в расчетном объеме (с).

Цвет показывает время жизни капель; b: $\langle u'_{\text{vap}} / m_0 \rangle$ при $x = -3$ (1), $-1,5$ (2), 0 (3) мм.

распределение количества капель в один момент времени в зависимости от продольной координаты капли (за вычетом координаты места, из которого капля инжектировалась). Видно, что количество капель, достигающих расстояния, равного длине форсунки (~ 1 см), незначительно, большая часть капель испаряется до расстояния 5 мм от места инъекции. Видно линейную зависимость спадания массы капель от расстояния после выхода из сопла.

Следует отметить, что при использовании гексадекана вместо *n*-гептана в качестве топлива процесс испарения будет проходить медленнее из-за более высокой температуры кипения и большего размера капель. Поэтому эффективное перемешивание и распыление имеют определяющее значение для достижения необходимых характеристик однородности смеси.

Эффект коалесценции капель и их начального диаметра

Для рассматриваемого режима течения с малым расходом топлива и малыми числами Вебера капля столкновения капель должны быть редки и не должны оказывать значительного влияния на скорость испарения топлива. Для проверки этой гипотезы

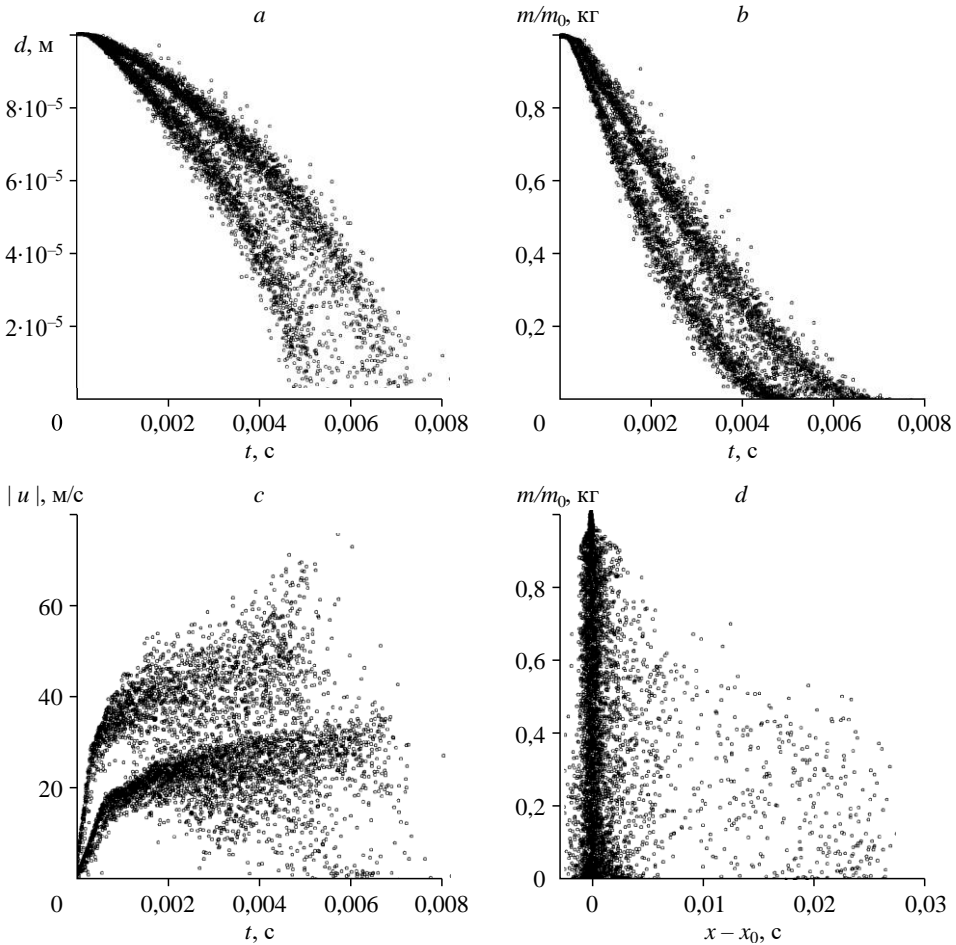


Рис. 10. Диаметры (а), массы (b) и скорости (с) капель в зависимости от времени, прошедшего с момента инъекции, а также зависимость массы капли от продольной координаты за вычетом координаты инъекции (d).

была проведена дополнительная серия расчетов с включенным учетом процесса столкновения капель и их коалесценции по модели [25]. Помимо этого, был проведен дополнительный расчет с уменьшенным в два раза начальным диаметром капель (50 мкм) с целью оценки влияния размера капель на теплообмен в данной конфигурации. Результаты сравнения полученных средних распределений паров топлива приведены на рис. 11.

На рис. 11а, 11б видно, что включение модели столкновения капель не оказывает заметного влияния на процесс испарения топлива в рассматриваемом режиме течения, заметно лишь незначительное увеличение массовой доли пара во входных каналах форсунки там, где идет процесс разгона капель и их инерция относительно потока газа максимальна. Таким образом, можно заключить, что коалесценция капель не оказывает существенного эффекта на испарение топлива для данного режима течения.

Уменьшение диаметра капель в два раза (рис. 11с) при сохранении массового расхода топлива ведет к ускорению процесса испарения за счет увеличившейся площади межфазной поверхности. Это заметно по большей концентрации паров топлива во внутренних каналах форсунки. Однако концентрация паров в критическом сечении вырастет незначительно. Это является следствием того, что для обоих начальных диаметров капель (50 и 100 мкм) к моменту прохождения потоком критического сечения выходного сопла большая часть жидкого топлива уже испарилась.

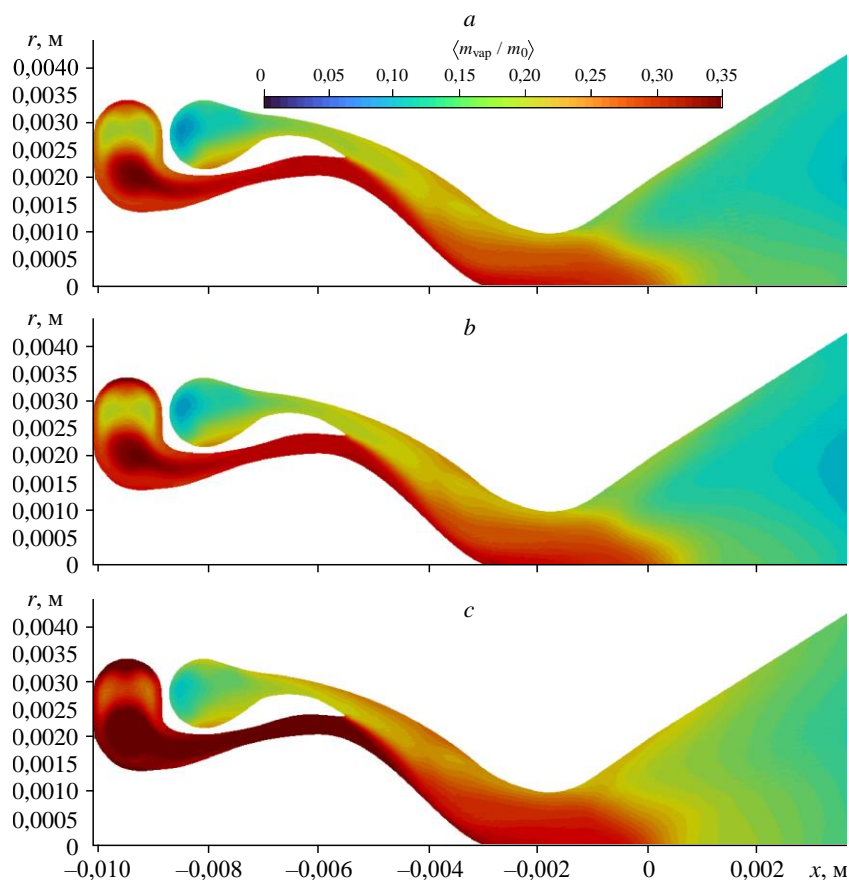


Рис. 11. Распределение массовой доли паров топлива в продольном сечении потока с осреднением за 0,01 с для начального диаметра капель 100 мкм без учета столкновений капель (а), начального диаметра капель 100 мкм с учетом столкновений капель (б) и начального диаметра капель 50 мкм с учетом столкновений капель (с).

Заключение

Расчеты, проведенные в настоящей работе, показывают, что предложенная модель форсунки является эффективной для испарения жидкого дизельного топлива и перемешивания его с перегретым водяным паром в режимах с малым расходом топлива. Противовращение двух частей потока, имеющее место внутри форсунки, приводит к формированию областей интенсивного сдвига и турбулизации потока после выхода из сопла, что должно способствовать эффективному разбиению струи жидкости на капли без использования повышенного давления для подачи топлива, а также эффективному испарению и перемешиванию паров топлива с водяным паром. Предполагается дальнейшее экспериментальное исследование данной модели форсунки в прототипе действующего риформера дизельного топлива.

Показано, что наличие когерентных структур и их взаимодействие между собой приводит к интенсивному перемешиванию и распределению смеси в радиальном направлении. Дополнительного исследования требует процесс первоначальной атомизации топлива и процесс взаимодействия жидкости со стенкой, для чего необходимы расчеты с разрешением межфазной границы.

Список литературы

1. Rogozhnikov V.N., Rogozhnikov V.N., Kuzin N.A., Snytnikov P.V., Potemkin D.I., Shoynkhorova T.B., Simonov P.A., Shilov V.A., Ruban N.V., Kulikov A.V., Sobyenin V.A. Design, scale-up, and operation of a Rh/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_{2-δ}-η-Al₂O₃/FeCrAl alloy wire mesh honeycomb catalytic module in diesel autothermal reforming // Chemical Engng J. 2019. Vol. 374. P. 511–519.
2. Zazhigalov S.V., Rogozhnikov V.N., Snytnikov P.V., Potemkin D.I., Simonov P.A., Shilov V.A., Ruban N.V. Simulation of diesel autothermal reforming over Rh/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_{2-δ}-η-Al₂O₃/FeCrAl wire mesh honeycomb catalytic module // Chemical Engng and Processing-Process Intensification. 2020. Vol. 150. P. 107876–1–107876-7.
3. Porš Z., Pasel J., Tschauder A., Dahl R., Peters R., Stolten D. Optimised mixture formation for diesel fuel processing // Fuel Cells. 2008. Vol. 8, No. 2. P. 129–137.
4. Pasel J., Samsun R.C., Meißner J., Tschauder A., Peters R. Recent advances in diesel autothermal reformer design // Intern. J. Hydrogen Energy. 2020. Vol. 45, No. 3. P. 2279–2288.
5. Pasel J., Samsun R.C., Tschauder A., Peters R., Stolten D. Advances in autothermal reformer design // Applied Energy. 2017. Vol. 198. P. 88–98.
6. Kim S., Dean A.M. The impact of fuel evaporation on the gas-phase kinetics in the mixing region of a diesel autothermal reformer // Intern. J. Hydrogen Energy. 2015. Vol. 40, No. 45. P. 15477–15490.
7. Peters R., Pasel J., Samsun R.C., Scharf F., Tschauder A., Müller M., Müller A., Beer M., Stolten D. Spray formation of middle distillates for autothermal reforming // Intern. J. Hydrogen Energy. 2017. Vol. 42, No. 27. P. 16946–16960.
8. An S.M., Kim W.S., Lee S.Y. Spraying of liquid fuel for improvement of reforming performance for hydrogen generation // Intern. J. Hydrogen Energy. 2011. Vol. 36, No. 9. P. 5342–5349.
9. Lefebvre A.H. Some recent developments in twin-fluid atomization // Particle & Particle Systems Characterization. 1996. Vol. 13, No. 3. P. 205–216.
10. Weller H.G., Tabor G., Jasak H., Fureby C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques // Computers in Physics. 1998. Vol. 12, No. 6. P. 620–631.
11. Vängö M. CFD modelling of direct gas injection using a Lagrangian Particle Tracking approach // MSc. Thesis. Lund University. Lund, Sweden. 2015. 66 p.
12. Oulette P., Hill P.G. Turbulent transient gas injections // J. of Fluids Engng. 1999. Vol. 122, No. 4. P. 743–752.
13. Desantes J.M., Garcia-Oliver J.M., Pastor J.M., Pandal A. A comparison of diesel sprays CFD modeling approaches: DDM versus Σ-Y Eulerian atomization model // Atomization and Sprays. 2016. Vol. 26, No. 7. P. 1–24.
14. Ghasemi K.A. Numerical simulation of non-reactive evaporative Diesel sprays using OpenFOAM // MSc. Thesis. Politecnico di Milano. Milan, Italy, 2017. 79 p.
15. Abul Kalam Azad T.A. Computational modeling of turbulent ethanol spray flames in a hot diluted coflow using OpenFOAM // MSc. Thesis. TU Delft, Delft. The Netherlands. 2015. 85 p.
16. Liang H., Erkan N., Solans V., Suzuki S. Numerical simulation and validation of aerosol particle removal by water spray droplets with openFOAM during the Fukushima Daiichi Fuel Debris Retrieval // Frontiers in Energy Research. 2020. Vol. 8, No. 102. P. 1–15.

17. **Hrebtov M.Y., Bobrov M.S., Zhakebayev D.B., Karzhaubayev K.K.** Mixed lagrangian-eulerian simulation of interaction between a shockwave and a cloud of water droplets // J. of Engng Thermophysics. 2020. Vol. 29, No. 2. P. 254–263.
18. **Rolo L.I., Caco A.I., Queimada A.J., Marrucho I.M., Coutinho J.A.** Surface tension of heptane, decane, hexadecane, eicosane, and some of their binary mixtures // J. of Chemical & Engng Data. 2002. Vol. 47, No. 6. P. 1442–1445.
19. **O'Rourke P.J.** Collective drop effects on vaporizing liquid sprays // PhD Thesis. Princeton University, Princeton, USA, 1981. 320 p.
20. **Ranz W.E., Marshall W.R.** Evaporation from drops // Chemical Engng Progress. 1952. Vol. 48, No. 3. P. 141–146.
21. **Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N.** Transport phenomena. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 2002. 912 p.
22. **Hinze, J.O.** Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes // AIChE J. 1955. Vol. 1, No. 3. P. 289–295.
23. **Jadidbonab H., Malgarinos I., Karathanassis I., Mitroglou N., Gavaises M.** We-T classification of diesel fuel droplet impact regimes // Proceedings of the Royal Society A: mathematical, Physical and Engng Sci. 2018. Vol. 474, No. 2215. P. 20170759-1–20170759-20.
24. **Lipson N., Chandra S.** Cooling of porous metal surfaces by droplet impact // Intern. J. of Heat and Mass Transfer. 2020. Vol. 152. P. 119494-1–119494-11.
25. **Pischke P., Kneer R., Schmidt D.P.** A comparative validation of concepts for collision algorithms for stochastic particle tracking // Computers & Fluids. 2015. Vol. 113. P. 77–86.

*Статья поступила в редакцию 23 июня 2023 г.,
после доработки — 29 августа 2023 г.,
принята к публикации 21 ноября 2023 г.*