

## Тема работы

Разработка высокопроизводительного комплекса расчета процесса работы реактора производства технического углерода на основе трехмерной численной VOF модели распыла и испарения сырья в потоке газа-теплоносителя.

## Состав коллектива

Дэниел Тарраф, аспирант третьего курса, НГУ

Черный Сергей Григорьевич, д-р физ.-мат. наук, проф., ИТ СО РАН

## Информация о проекте:

Государственное задание ИТ СО РАН. Тема "Развитие фундаментальных основ перспективных энергоэффективных и экологически чистых технологий для широкого класса приложений, включая энергетику, биоинженерию и химическую промышленность" (рук. акад. Алексеенко С.В.) № государственной регистрации ЦИТиС 121031800229-1, 2021-2023

## Научное содержание работы:

### 1. Постановка задачи

Численное моделирование процесса распыла и испарения сырья с помощью моделей многофазного течения на основе пакетов программ ANSYS Fluent и OpenFOAM. Для численной реализации математической модели использовался аналог хорошо зарекомендовавшего себя метода жидкости в ячейках (VOF метод) [1]. Выбор наиболее адекватной модели, на основе которой можно решать оптимизационные задачи для максимизации степени испарения, что приводит к улучшению качества технического углерода (меньше загрязнения).

### 2. Современное состояние проблемы

Печной процесс получения технического углерода является жесткой формой гомогенного пиролиза углеводородов (сырья) в потоке газа-теплоносителя [2]. Газ-теплоноситель представляет собой газовую смесь продуктов сгорания природного газа с температурой до 1900 °C и с составом: N<sub>2</sub> ~ 73%, H<sub>2</sub>O ~ 15%, CO<sub>2</sub> ~ 7%, O<sub>2</sub> ~ 5%. Продукты полного сгорания топлива поступают в зону смешения, где происходит интенсивное перемешивание их с впрыскиваемым сырьем, сопровождающееся быстрым дроблением и испарением капель сырья. В процессе получения технического углерода важно, чтобы сырье полностью испарялось до начала пиролиза, поскольку технический углерод образуется при разложении углеводородов в газообразном состоянии. Если же происходит разложение жидких капель сырья при высоких температурах, то образуются частицы кокса, загрязняющие продукт.

Сырье вводится форсунками, которые конструируются таким образом, чтобы достичь наилучшего распыла сырья и более равномерного распределения капель в газовом потоке. От степени распыла сырья в определенной степени зависит структурность технического углерода, а также вероятность образования грига [3].

В связи с необходимостью выпуска новых марок технического углерода и применения альтернативных видов сырья в конструкцию реактора вносятся изменения. Возникает необходимость численного моделирования процесса работы реактора. В связи с этим

разработана трехмерная численная модель распыла и испарения сырья, подаваемого радиально через форсунку поперек осевого потока газа-теплоносителя.

### **Список литературы**

1. Hirt, C. W. & Nichols, B. D. (1981) Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries // Journal of Computational Physics 39 (1981), P. 201-226.
2. Гульмисарян Т.Г., Капустин В.М., Левенберг И.П. // Технический углерод: морфология, свойство, производство. М.: «Издательство «Каучук и Резина», 2017 – С. 586
3. В. Ю Орлов, А.М. Комаров, Л.А. Ляпина // Производство и использование технического углерода для резин – Ярославль, Издательство Александр Рутман, 2002 – С. 512
4. Сипатов А.М., Карабасов С.А., Гомзиков Л.Ю., Абрамчук Т.В., Семаков Г.Н. Моделирование процесса распыла с использованием адаптивных сеточных моделей // Вычислительная механика сплошных сред. – 2015. – Т. 8, № 1. – С. 93-101.
5. Wu P.-K., Kirkendall K.A., Fuller R.P., Nejad A.S. Spray structures of liquid jets atomized in subsonic crossflows // J. Propul. Power. -1998. - Vol. 14, N. 2. P. 173-182.

### **3. Подробное описание работы**

Для описания работы реактора используются модели многофазных течений. Многофазные течения — это смеси разных потоков (называемые фазами) взаимодействующих друг с другом одновременно. Существует много многофазных моделей, но они подразделяются на две основные группы: эйлерово-эйлеровы и эйлерово-лагранжевы. Выбор адекватной модели определяется тем, как присутствуют фазы и как они взаимодействуют друг с другом. Например, если рассматривать распыл жидкости в поток воздуха. Первая часть струи жидкости непрерывная. Для моделирования этой части потоков больше подходит эйлерово-эйлерова модель. Струя жидкости со временем распадается на капли. Эта часть жидкости более количественная. Под количественностью, подразумевается количество капель, их диаметры, массы, скорости и т. д. В этом случае более подходящими эйлерово-лагранжевы модели.

Первая часть нашего исследования заключается в моделировании первого этапа производства технического углерода — распыления сырья из сопла в газ-теплоноситель. На основании приведенных выше рассуждений будет использоваться эйлерово-эйлерова модель. Особенностью этой задачи является наличие четкой границы между фазами, поскольку жидкая струя сырья еще не распалась. На этом этапе будет использоваться модель VOF, которая считается экономичной эйлерово-эйлеровой моделью. В этой модели, для упрощения, испарение сырья не будет учитываться, и модель будет состоять только из двух фаз: несжимаемого газа-теплоносителя и несжимаемой жидкости-сырья.

Входящий газ-теплоноситель имеет скорость  $\sim 420$  м/с. При такой скорости газ-теплоноситель было бы более уместно моделировать как сжимаемая жидкости. Следовательно, вторым шагом в этой работе будет улучшение используемой модели, чтобы она стала двухфазной моделью VOF со сжимаемым теплоносителем и несжимаемой сырьевой жидкостью.

С исходной областью сложно работать. Это связано, во-первых, с малыми размерами сопел по сравнению со всем реактором. Во-вторых связано с требованиями модели VOF (наличие четкой границы между фазами). Следовательно, заполнение расчетной области ячейками одинакового размера и достаточно маленькими для удовлетворения требований модели VOF, приведет к образованию огромного количества ячеек, поскольку невозможно выполнить расчет с помощью доступной технологии. Локальное уточнение ячеек может решить проблему маленького сопла,

но поскольку эта задача считается нестационарной, локальное уточнение не обеспечит выполнение требований модели VOF. Третьим шагом этого исследования будет построение подходящей сетки с динамической адаптацией, чтобы обойти трудности, связанные с упомянутыми выше проблемами, а также сократить время расчета за счет минимизации ненужных уточнений. Минимизировать ненужное уточнение можно, проводя уточнение только на границе фаз.

Одним из важных параметров для задач такого типа является средний диаметр Заутера, его можно рассматривать как средний диаметр каплей распыляемой струи. Меньшие его значения указывают на большую поверхность взаимодействия между фазами. Для расчета этой величины необходим объем и площадь поверхности всех образовавшихся каплей. Модель VOF не дает нам напрямую информации о капле (поскольку это эйлерово-эйлеров подход), она дает только объемную долю сырья в каждой ячейке. Четвертый шаг — разработать и реализовать алгоритм, который учитывает по объемной доли и определяет расположение и диаметры каплей. По результатам работы этого алгоритма можно рассчитать средний диаметр Заутера. Этот алгоритм также можно рассматривать как транснациональную точку между эйлерово-эйлеровой и эйлерово-лагранжевой моделями.

Пятый шаг будет включать третью фазу, которая представляет собой продукт испарения сырья. А также настройка модели испарения-конденсации, описывающей массоперенос между жидкой и паровой фазами. Включенная паровая фаза, можно рассчитать степени испарения сырья.

Степень испарения — это параметр, который мы хотим максимизировать, и он станет основой для дальнейших исследований по оптимизации.

## 4. Полученные результаты

Несжимаемая двухфазная модель VOF, описывающая распыление воды в потоке воздуха, была реализована с помощью OpenFoam. Результат был сопоставлен с другими авторами и экспериментальными значениями.

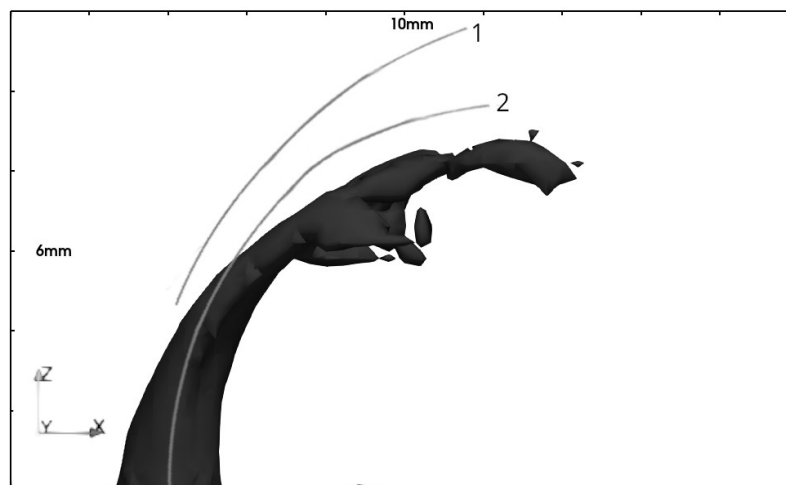


Рис. 1. Распределение объемной доли воды при значениях больших 0.5 (закрашенная область); центральная линия области распределения объемной доли воды, рассчитанной в [4] с помощью ПК ANSYS Fluent (линия 1); центральная линия струи воды и её распыла в эксперимента [5] (линия 2)

Использовалась двухфазная модель VOF со сжимаемым газом-теплоносителем и несжимаемой сырьевой жидкостью на адаптивной сетке, основанной на градиенте объемной доли. Адаптация, основанная на градиенте объемной доли, гарантирует, что уточнение происходит только на границе фаз, что сводит к минимуму ненужные уточнения и значительно увеличивает скорость вычислений.

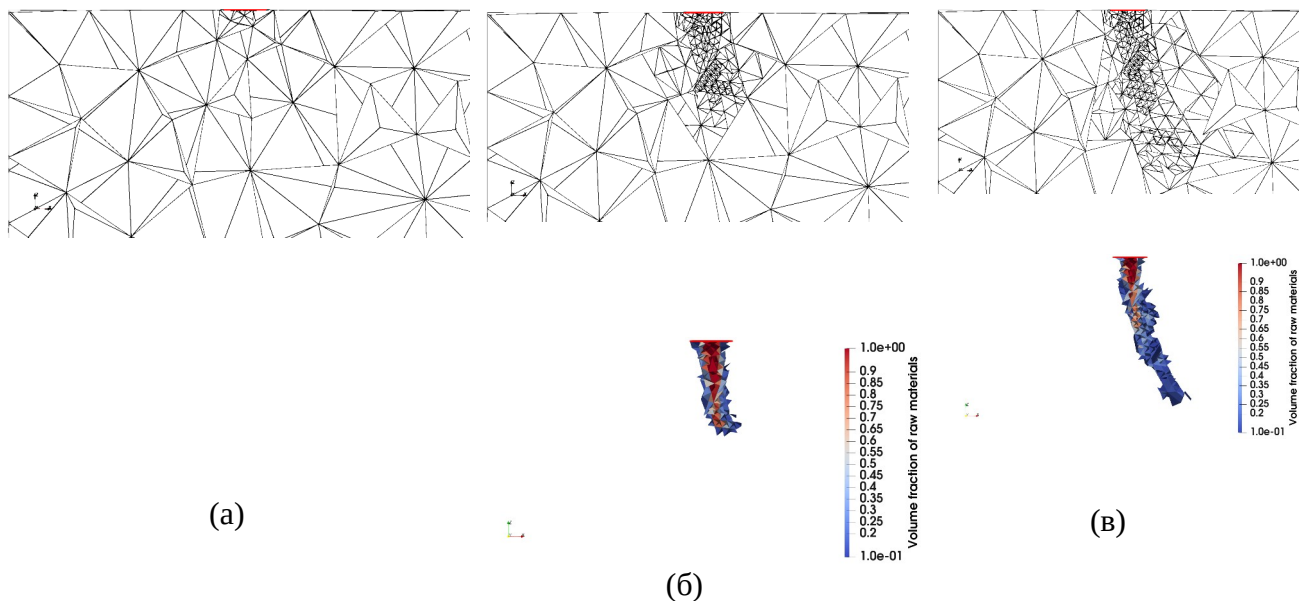


Рис. 2. Динамическая сетка, соответствующая градиенту объемной доли жидкости в моменты времени  $t=0$  (а);  $t=4 \times 10^{-4}$  s (б);  $t=9 \times 10^{-4}$  s (в)

Создан и реализован алгоритм формулировки капель по распределению объемной доли. Решалась задача распада жидкой пленки с использованием модели VOF и адаптивной сетки. Алгоритм был применен к распределению объемной доли от задачи распада жидкой пленки. Средний диаметр Заутера был рассчитан по результатам алгоритма и сверен с результатами других авторов [4].

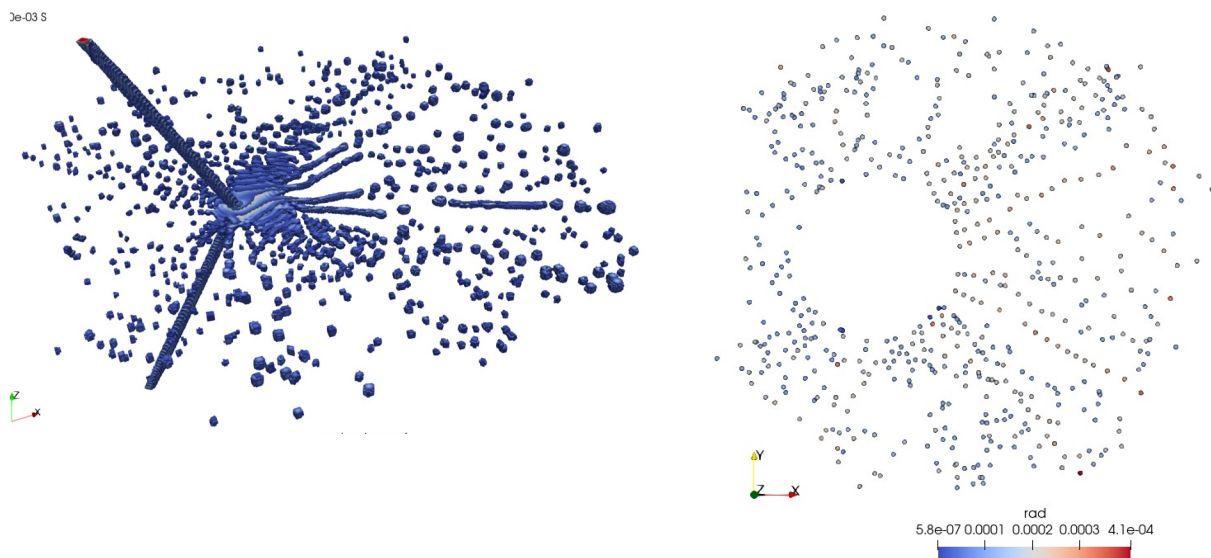


Рис. 3. Формирование каплей (справа) по распределению объемной доли жидкости (слева)

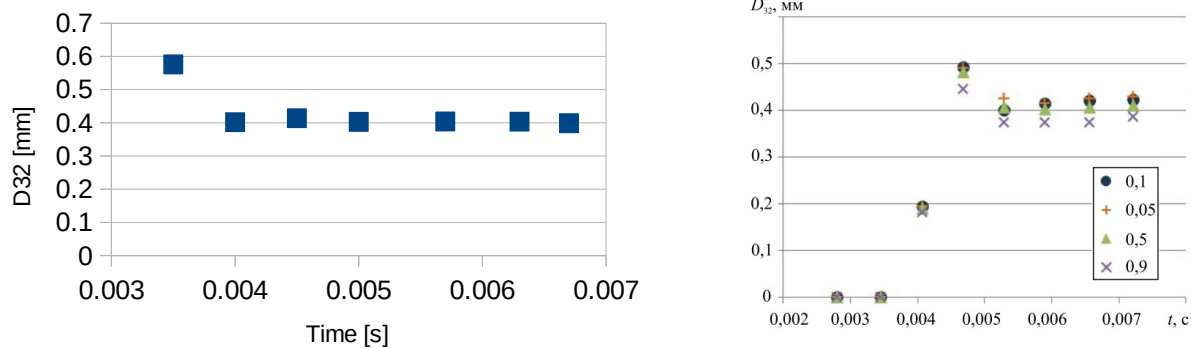


Рис. 4. Сравнение значения среднего диаметра Заутера от времени, рассчитанного по результатам алгоритма (слева) и рассчитанного другими авторами (справа)

## 5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Проведение численного моделирования с использованием десятков миллионов расчетных ячеек на обычных рабочих станциях невозможно как вследствие большого объема требуемой памяти, так и по времени счета. Одним из способов решения этой проблемы является разделение расчетной сетки на зоны и параллельное выполнение соответствующих расчетов в этих зонах. Кластер предоставляет необходимые узлы (nodes), по которым распределяются эти зоны, а также необходимую требуемую память.

## Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Тарраф Д. Трехмерная численная модель распыла и испарения жидкости в газе // Математика: Материалы 60-й Междунар. науч. студ. конф. 10–20 апреля 2022 г., Новосиб. гос. ун-т., Новосибирск, С. 94.
2. Тарраф Д. Численное моделирование процесса производства технического углерода // Материалы XVII Всероссийской школы-конференции «Актуальные вопросы теплофизики и физической гидрогазодинамики», г. Шерегеш, 19-24 марта 2023 г., С. 90.
3. Тарраф Д. Ускорение численного решения трехмерной задачи распыла жидкости потоком газа посредством циклической постановки задачи // Математика: Материалы 61-й ММеждународ. науч. студ. конф., 17-26 апреля, 2023 г., Новосиб. гос. ун-т., Новосибирск, С.163
4. Tarraf D., Cherny S. Comparative analysis of Euler models of multiphase flows in the ANSYS software for the problem of spraying raw materials in a heat-carrier gas flow in the furnace production of carbon black // E3S Web of Conferences. XXXIX Siberian Thermophysical Seminar – 2023. – 459, 04015. – p. 7. DOI:10.1051/e3sconf/202345904015