

ТЕПЛО- И МАССООБМЕН,
СВОЙСТВА РАБОЧИХ ТЕЛ И МАТЕРИАЛОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБЪЕМНОЙ КОНДЕНСАЦИИ
ПРИ ИСТЕЧЕНИИ ПАРОГАЗОВОЙ СМЕСИ ЧЕРЕЗ СОПЛО МЕТОДАМИ
CFD С ПРИМЕНЕНИЕМ СПЕЦИАЛЬНОГО РАСЧЕТНОГО МОДУЛЯ¹

© 2023 г. А. А. Сидоров^а, *, А. К. Ястребов^а

^аНациональный исследовательский университет “Московский энергетический институт”,
Красноказарменная ул., д. 14, Москва, 111250 Россия

*e-mail: AlexSid-MPEI@yandex.ru

Поступила в редакцию 26.08.2022 г.

После доработки 04.10.2022 г.

Принята к публикации 26.10.2022 г.

Объемная конденсация — один из наиболее распространенных термодинамических процессов. Однако ввиду сложности его моделирования расчетные исследования зачастую ограничены одномерной постановкой задачи и простыми формами каналов. В настоящей работе представлен расчетный модуль “Объемная конденсация”, основанный на решении кинетического уравнения методом моментов для функции распределения капель по размерам. Модуль усовершенствован с учетом пользовательских скаляров (UDS — user-defined scalar) и источниковых членов и интегрирован в расчетный CFD-пакет. Благодаря модификации модуля существенно повышены устойчивость и точность решения, а также уменьшено расчетное время. Разработанная модель конденсации и ее реализация с помощью модуля верифицированы для одно-, двух- и трехмерной постановок в стационарном и нестационарном приближениях путем сравнения с двумя наборами экспериментальных данных сторонних авторов на примере задачи об объемной конденсации при сверхзвуковом расширении парогазовой смеси в сопле. В ходе решения получены распределения давления, температур, плотности, степени пересыщения, массовой доли конденсата, числовой плотности и среднего размера капель как по сечениям, так и вдоль центральной линии рассматриваемых сопл. Подтвержден важный вывод о необходимости учета не только образования капель, но и их роста, так как именно этот процесс оказывает основное влияние на термогазодинамику процесса. Показано, что реализации в двумерном и трехмерном вариантах постановки задачи практически совпадают, что позволяет сделать вывод о возможности применения двумерных постановок для решения подобных задач с простым профилем каналов.

Ключевые слова: объемная конденсация, нуклеация, парогазовая смесь, термогазодинамика, конечно-объемное моделирование, CFD-методы, численные методы, кинетическое уравнение

DOI: 10.56304/S0040363623040070

Данная публикация является прямым продолжением статьи [1], посвященной исследованию процесса объемной конденсации при истечении парогазовой смеси через сопло в одномерной постановке, а также оценке влияния геометрических параметров канала на характеристики конденсационного аэрозоля. Основная цель настоящей работы заключается в переходе к рассмотрению этой задачи в двух- и трехмерной постановках в стационарном и нестационарном приближениях, а также в верификации обновленного расчетного модуля “Объемная конденсация” путем сравнения результатов расчетов с данными двух независимых экспериментов сторонних авторов и с полученным ранее решением задачи в одномерной поста-

новке. Результаты применения модуля были качественно верифицированы в работе [2], однако впоследствии модуль был существенно улучшен и переработан, что позволило провести не только качественное, но и количественное сравнение.

В ходе подготовки настоящей работы было изучено большое количество источников, в которых рассматривается современное состояние исследований объемной конденсации. В отечественном сегменте научной литературы можно выделить теоретическую школу объемной конденсации, в частности работы М.Е. Дейча [3, 4], Д.И. Плачендовского [5], Н.М. Корценштейна [6–8], Д.И. Жуховицкого [9], В.Ю. Гидаспова [10] и др. Работы зарубежных авторов в основном имеют практический, т.е. экспериментальный, характер [11–13]. За последние годы было выпущено более 15 трудов, которые ввиду достаточно

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-19-00044).

последовательного описания позволяют составить общую картину. Проанализировав современное состояние проблемы, можно отметить, что объемная конденсация как явление не теряет своей актуальности и продолжает притягивать внимание исследователей. С развитием технологий, а также с появлением новых и усовершенствованием старых методов и подходов открываются горизонты для изучения столь важной для науки и техники темы.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе рассматривается парогазовая смесь, состоящая из азота N_2 , выступающего в качестве неконденсирующегося газа-носителя, и паров тяжелой воды D_2O или обычной воды H_2O в качестве конденсирующейся примеси. Выбор компонентов смеси обусловлен наличием экспериментальных данных [14, 15], а их теплофизические свойства принимаются зависящими от температуры [16–18]. Задача решается в однотемпературном приближении, в рамках которого температура каплей считается равной температуре газовой фазы. Такой подход является оправданным в случае малой концентрации конденсирующегося компонента в смеси [8]. В настоящей работе объемная доля пара в смеси на входе в расчетную область не превышает 3%. Ввиду того что расчетная сетка не имеет призматического подслоя вблизи стенок (обоснование этого допущения будет дано далее), процессы в пограничном слое моделируются с помощью пристеночных функций, реализуемых расчетным пакетом. Предполагается, что течение в канале стабилизировано, а число Рейнольдса ниже критического, т.е. турбулентность не учитывается [19].

Математическое описание

В общем виде математическое описание термодинамики включает в себя систему уравнений, состоящую из уравнений Навье – Стокса для сжимаемого газа, а также уравнения диффузии и уравнения состояния (для компонентов парогазовой смеси используется уравнение состояния идеального газа). Ударные волны не моделируются, поэтому объемная вязкость не учитывается в уравнениях движения [20]. Используется система уравнений для сжимаемого газа, включающая в себя уравнения неразрывности, движения и энергии и записанная в общем виде для смеси:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0; \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \tau; \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} H) &= \nabla [\mathbf{u} \cdot \tau + \mathbf{q}] + S_e, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где ρ – плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$; \mathbf{u} – вектор скорости, $\text{м}/\text{с}$; p – давление, Па ; τ – тензор вязких напряжений, Па ; \mathbf{q} – вектор теплового потока, Вт ; E – полная энергия, Дж ; H – полная энтальпия, $\text{Дж}/\text{кг}$; S_e – объемный источник энергии, $\text{Дж}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$.

Дополнительное уравнение диффузии, представляющее собой закон сохранения массы для каждого q -го компонента смеси, выглядит следующим образом [21]:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (C_q \rho_q) + \nabla \cdot (C_q \rho_q \mathbf{v}_q) \right] = S_m + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}), \quad (2)$$

где ρ_q , C_q , \mathbf{v}_q – плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$, объемная доля и вектор скорости, $\text{м}/\text{с}$, q -го компонента; S_m – объемный источник массы, $\text{кг}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$; n – количество реагирующих компонентов; \dot{m}_{pq} , \dot{m}_{qp} – поток массы между p -м и q -м компонентами смеси, кг .

Очевидно, что сумма объемных долей компонентов должна быть равна единице:

$$\sum_{q=1}^n C_q = 1. \quad (3)$$

В работе приводятся два качественно различающихся подхода к решению задачи об объемной конденсации, ввиду чего предлагается рассмотреть их отдельно.

Одномерное решение

В первом случае численно решается полная система уравнений, описывающая сверхзвуковое истечение сжимаемой парогазовой смеси из плоского щелевого сопла с учетом объемной конденсации в одномерной и однотемпературной постановке методом Рунге – Кутты – Мерсона с автоматическим выбором шага в идеальном газе. Для проведения решения была разработана специальная программа. Такой подход является верифицированным, решению подобных задач посвящено довольно большое количество работ, в том числе и авторов данной статьи [1, 22, 23].

Двух- и трехмерное решение

При втором подходе рассматривается двумерная и/или трехмерная пространственная постановка в стационарном или нестационарном приближении. Для этого задача решается с применением методов конечных объемов в расчетном CFD-пакете, который дополнен специальным интегрируемым расчетным модулем “Объемная конденсация” [24] для учета процессов фазовых переходов и их влияния на термодинамику потока. Принцип работы модуля совместно с пакетом представлен далее.

Описание кинетики конденсации

Для исследования процесса объемной конденсации к указанной ранее системе уравнений движения, энергии, состояния необходимо добавить формулу, учитывающую кинетику конденсации. В основе описания этого процесса лежит кинетическое уравнение для функции распределения капель по размерам, в общем виде представляемое как [25]:

$$\frac{\partial f_r}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_r + \frac{\partial}{\partial r}(\dot{r} f_r) = \frac{I}{\rho} \delta(r - r_{cr}), \quad (4)$$

где f_r – функция распределения капель по размерам, нормированная на количество капель в единице массы; \dot{r} – скорость роста капель, м/с; I – скорость нуклеации, $(\text{м}^3 \cdot \text{с})^{-1}$; δ – дельта-функция Дирака; r_{cr} – критический радиус капель, м.

Иногда используется также функция распределения частиц по размерам, нормированная на количество капель в единице объема:

$$f = \rho f_r. \quad (5)$$

Существует несколько подходов к решению уравнения (4). Особого внимания заслуживают два из них, наиболее часто применяемых и известных – прямое численное решение и метод моментов.

Прямое численное решение кинетического уравнения основано на методе [6], специально разработанном по аналогии с решением кинетического уравнения Больцмана и подразумевающим схему расщепления по физическим процессам. Этот метод часто применяется для решения задач объемной конденсации в одномерной постановке и имеет положительные стороны, такие как отсутствие ограничений по числу Кнудсена, связанных с зависимостью скорости роста капель от их размера при переходном и континуальном режимах. Однако использование этого метода для задач в неоднородной постановке существенно усложняется из-за динамически перестраиваемых сеток, размер элементов которых для обеспечения сходимости не должен превышать размеры получаемых капель. Применение такого подхода в сторонних пакетах, основанных на методе конечных объемов, не представляется целесообразным, так как требует запредельных, по сравнению с другими методами, вычислительных мощностей.

Не менее популярным является метод моментов. Несмотря на то что он имеет ряд ограничений, которые разрешаются принятием некоторых допущений, о которых будет сказано далее, главный его плюс заключается в отсутствии зависимости размера элементов сетки от размера капель. Это исключает необходимость динамического перестроения сеток, и метод может быть интегрирован в качестве отдельного модуля в уже готовые и известные расчетные CFD-пакеты.

Благодаря этому можно рассматривать задачи, например об объемной конденсации в машинах и аппаратах криогенной техники, вне зависимости от сложности исходной геометрической модели. Именно поэтому в настоящей работе применяется метод моментов.

В основе указанного метода лежит определение момента функции распределения, под которым понимают интеграл от произведения радиуса капли в степени n и функции распределения по радиусам:

$$\Omega_n = \int_{r_{cr}}^{\infty} r^n f dr. \quad (6)$$

Если полагать, что скорость роста не зависит от радиуса капли, то, умножив правую и левую части основного кинетического уравнения для функции распределения капель по размерам (4) на r^n и проинтегрировав полученное выражение по радиусу r в пределах от r_{cr} до бесконечности, можно вывести в общем виде систему моментных уравнений:

$$\frac{\partial \Omega_n}{\partial t} = n \dot{r} \Omega_{n-1} + I r_{cr}^n - \nabla \mathbf{v} \Omega_n. \quad (7)$$

Важно отметить, что при таком подходе фактически не используется сама функция распределения капель по размерам, однако при необходимости она может быть восстановлена. Физический смысл имеют только первые четыре момента ($n = 0, \dots, 3$), на основе которых можно получить главные характеристики конденсационного аэрозоля. Так, нулевому моменту соответствует количество образовавшихся капель в единице массы или объема в зависимости от нормировки функции распределения, отношение первого момента к нулевому дает средний радиус капель, второй момент характеризует общую площадь поверхности капель, а третий, соответственно, их объем.

Помимо кинетического уравнения, описание кинетики конденсации также включает в себя некоторые важные параметры, которым следует дать определение. Так, необходимым условием для возникновения фазового перехода является пересыщение, возникающее, например, при резком расширении потока при истечении смеси через сопло. Такое состояние характеризуется безразмерной степенью пересыщения $s = p_v / p_s(T)$, которая показывает отношение давления пара p_v к давлению насыщенного пара p_s при температуре смеси T . Для возникновения конденсации необходимо, чтобы степень пересыщения была больше единицы.

В пересыщенном паре капля растет, если ее радиус превышает критический радиус, под которым понимается такой размер конгломерата мо-

лекул, при котором эта структура становится стабильной, т.е., если размер капли меньше критического радиуса, она может испаряться, а если больше – то расти. В настоящей работе используется классическая теория нуклеации Френкеля – Зельдовича со всеми соответствующими допущениями, ввиду чего для вычисления критического радиуса применяется известная формула Томпсона

$$r_{cr} = \frac{2\sigma(T)}{\rho_l(T)RT \ln s}, \quad (8)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения, Н/м; R – индивидуальная газовая постоянная, Дж/(моль · К); ρ_l – плотность конденсата, кг/м³.

Для определения скорости роста капель используется формула Герца – Кнудсена для одно-температурной постановки

$$\dot{r} = \frac{dr}{dx} = \frac{\alpha p_s}{\rho_l(T)} \left(\frac{s-1}{\sqrt{2\pi R_v T}} \right), \quad (9)$$

где α – коэффициент конденсации.

Одной из важнейших характеристик процесса конденсации является скорость нуклеации – параметр, показывающий количество образующихся капель радиусом, равным критическому, в единице объема в единицу времени. Для определения скорости нуклеации существует несколько исторически сложившихся подходов. В настоящей статье используется классическая теория нуклеации Френкеля – Зельдовича, основанная во многом на работах Фольмера и Вебера, а также Беккера и Дёринга [25].

В рамках классической теории нуклеации скорость зародышеобразования, или нуклеации, в общем виде определяется как

$$I = \left(\frac{\alpha}{\rho_l} \right) \left(\frac{p_v}{RT} \right)^2 \sqrt{\frac{2\mu_v \sigma N_A^3}{\pi}} \times \exp \left[- \frac{16\pi N_A \left(\frac{\sigma}{R} \right)^3 \left(\frac{\mu_v}{\rho_l} \right)^2}{3T^3 (\ln s)^2} \right], \quad (10)$$

где μ_v – молярная масса пара, кг/моль; N_A – постоянная Авогадро, моль⁻¹.

В формулу Томпсона, как и в формулу для скорости нуклеации, входит коэффициент поверхностного натяжения σ , применимость которого для наноразмерных капель может быть поставлена под сомнение, ввиду, очевидно, необходимости учитывать кривизну поверхности капли. Благодаря хорошему согласованию экспериментальных данных с результатами, полученными не только в ходе настоящего исследования (об этом будет сказано далее), но и другими научными

группами [26], в иной пространственной постановке [22] и даже с применением методов, отличных от настоящего, для решения кинетического уравнения [1] в рамках все той же классической теории нуклеации Френкеля – Зельдовича, допущение о независимости поверхностного натяжения от кривизны поверхности может быть оправдано. При этом важно отметить, что в настоящей работе используется зависимость коэффициента поверхностного натяжения от температуры, так как, как было показано в [1], учет температурной зависимости существенно влияет на критический радиус и скорость нуклеации.

АДАПТАЦИЯ МОМЕНТНОГО МЕТОДА К ИНТЕГРАЦИИ В CFD-ПАКЕТ

В том виде, в котором представлена система моментных уравнений (7), интеграция в расчетный пакет невозможна в силу специфики CFD-решателей. Для этого необходимо адаптировать систему к возможности расчета в каждой ячейке расчетной сетки.

Расчетный CFD-пакет позволяет учитывать до 50 дополнительных уравнений, или, в рамках терминологии, пользовательских скаляров (UDS), которые разрешаются непосредственно пакетом. Классическое представление уравнения для скаляра в расчетном пакете выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial \Phi_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(F_i \Phi_k - D_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_i} \right) = S_{\Phi_k}, \quad (11)$$

где Φ_k – искомая функция; F_i – удельный поток массы, кг/с; D_k – коэффициент молекулярного переноса, м²/с; S_{Φ_k} – источниковый член.

Индекс k в (11) относится к номеру пользовательского скаляра ($k = 0, \dots, 49$), индекс i подразумевает суммирование по пространственным направлениям.

Принимая, что возможен только конвективный перенос капель, т.е. в уравнении (11) $D_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_i} = 0$, а также преобразуя исходную систему уравнений (7), можно получить адаптированную систему моментных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho \Omega_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (F_i \Omega_0) &= S_{\Omega_0}; \\ \frac{\partial \rho \Omega_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (F_i \Omega_1) &= S_{\Omega_1}; \\ \frac{\partial \rho \Omega_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (F_i \Omega_2) &= S_{\Omega_2}; \\ \frac{\partial \rho \Omega_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (F_i \Omega_3) &= S_{\Omega_3}. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Левая часть системы уравнений разрешается расчетным пакетом штатно, однако для этого предварительно необходимо определить источниковые члены и передать эти данные в пакет. Источниковые члены для скаляров (правая часть) выглядят следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} S_{\Omega_0} &= I; \\ S_{\Omega_1} &= Ir_{cr} + \dot{r}\rho\Omega_0; \\ S_{\Omega_3} &= Ir_{cr}^2 + 2\dot{r}\rho\Omega_1; \\ S_{\Omega_3} &= Ir_{cr}^3 + 3\dot{r}\rho\Omega_2. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Значения источниковых членов определяются в специальном расчетном модуле “Объемная конденсация” [24] в каждой ячейке расчетной сетки на каждом шаге по времени для нестационарного решателя (или на каждой итерации для стационарного решателя) и передаются в пакет. Такая постановка позволяет решать задачи истечения смесей через расширительные устройства при наличии объемной конденсации в двух- и трехмерных, стационарных и нестационарных постановках для каналов любой формы.

ОБЪЕМНЫЕ ИСТОЧНИКИ МАССЫ И ЭНЕРГИИ

Рождение новой фазы, т.е. капель конденсата, а также тепловыделение при конденсации в специальном расчетном модуле “Объемная конденсация” [24] учитываются через объемные источники массы S_m и энергии S_e . При этом данные источники в настоящей работе состоят из двух слагаемых: в первом учитывается вклад образования капель, а во втором – их роста.

Объемный источник массы конденсата записывается следующим образом:

$$S_m = \frac{4}{3}\pi r_{cr}^3 \rho_l I + 4\pi r_{cr} \rho_l \dot{r} \Omega_2, \quad (14)$$

где Ω_2 – второй момент функции распределения капель по размерам.

Очевидно, что сток массы для паровой фазы равен S_m по модулю и противоположен по знаку.

Объемный источник энергии в рамках одно-температурной модели имеет следующий вид:

$$S_e = S_m L(T), \quad (15)$$

где $L(T)$ – теплота парообразования.

Использование источниковых членов позволяет существенно упростить решение задачи. Так, например, не требуется отдельно определять температуру смеси или считать в явном виде межфазный тепловой поток – расчетный пакет уже имеет необходимые для этого инструменты.

ОПИСАНИЕ РАБОТЫ СПЕЦИАЛЬНОГО РАСЧЕТНОГО МОДУЛЯ “ОБЪЕМНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ”

Особенность модуля для решения моментных уравнений для функции распределения капель по размерам заключается в том, что при интеграции в уже готовый расчетный пакет отпадает необходимость дополнительно описывать и решать системы уравнений неразрывности, движения, энергии и диффузии, что существенно упрощает решение системы моментных уравнений.

Подробное описание работы специального расчетного модуля “Объемная конденсация” уже приводилось авторами настоящей статьи в [2], однако на данном этапе развития модуль претерпел кардинальные изменения, о которых стоит упомянуть. Во-первых, переработана архитектура модуля: ранее система моментных уравнений численно рассчитывалась непосредственно в модуле в каждой ячейке расчетной сетки на основе данных, передаваемых через грани этой ячейки в явном виде, что сильно влияло на устойчивость работы модуля, а также на вычислительные мощности и время расчетов. При переходе к расчету источниковых членов для пользовательских скаляров были существенно повышены устойчивость и точность решения, а также уменьшено расчетное время. Во-вторых, в модуль добавлено автоматическое определение пространственной размерности задачи, что позволило сократить количество версий модуля. В-третьих, в новой редакции модуль может применяться как для стационарных расчетов, так и для нестационарных – добавлено автоматическое определение типа решателя. Также важно отметить, что применение модуля практически не влияет на общее время расчета, в том числе при оптимизации кода.

На рис. 1 представлен общий алгоритм работы модуля и его интеграции в расчетный пакет с учетом изменений, внесенных в новую версию.

ОПИСАНИЕ РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ

В настоящем разделе приведены данные по свойствам компонентов смеси в виде зависимостей параметров от температуры, определены характеристики геометрических моделей сопла, а также указаны начальные условия, при которых производились расчеты.

Свойства компонентов смеси

Далее описаны свойства только тяжелой воды, поскольку такие данные являются довольно редкими, в то время как для обычной воды найти информацию не составляет труда. Для упрощения представления свойства обычной воды не приводятся и берутся из [16, 18].

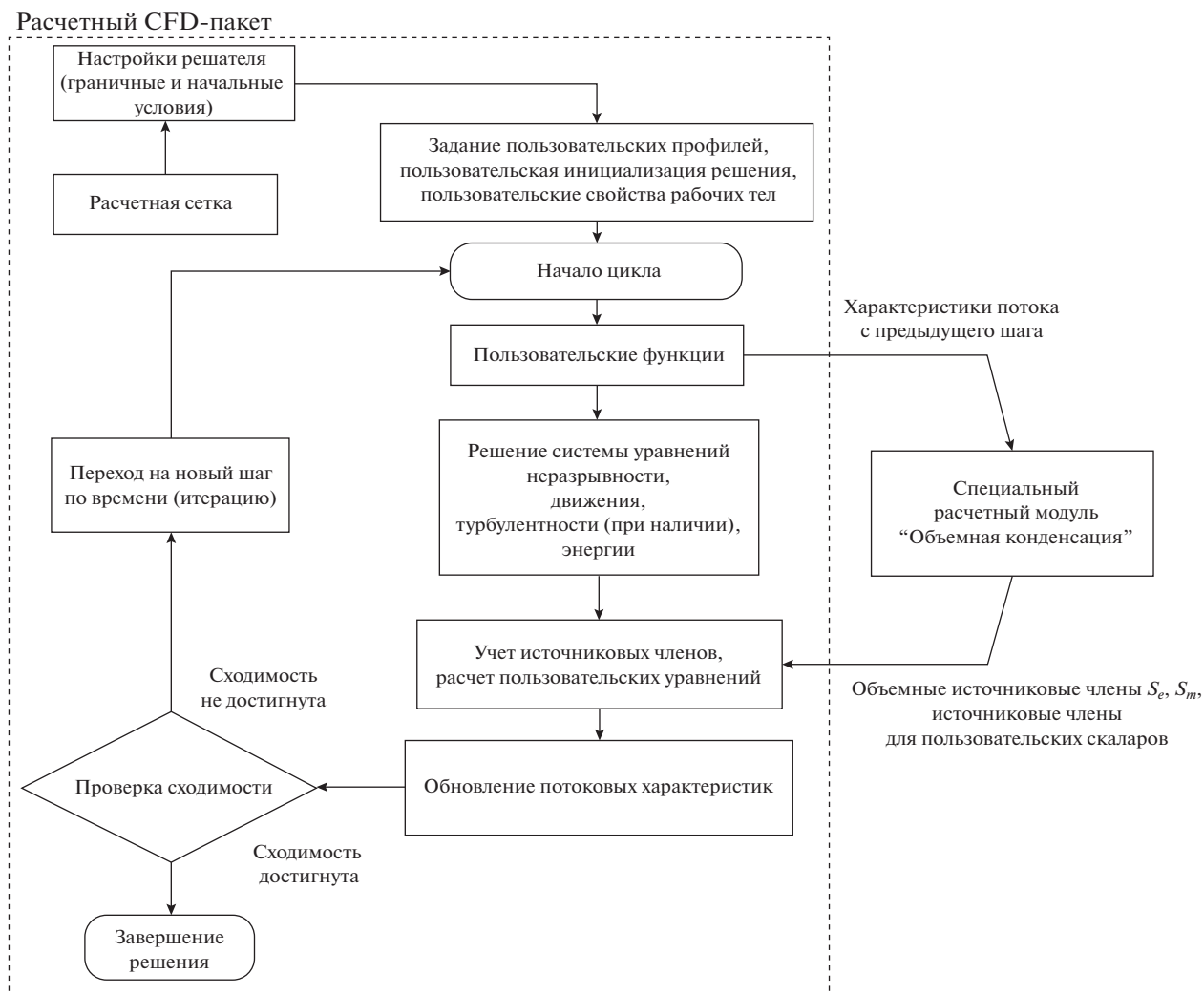


Рис. 1. Алгоритм работы расчетного пакета и интеграции специального модуля

Одна из важнейших характеристик, требуемых для моделирования объемной конденсации, — зависимость давления от температуры на линии насыщения, но, поскольку в настоящей работе характеристики потока определяются в области низких температур, ее заменяет кривая сублимации.

Рассматривается течение парогазовой смеси, состоящей из паров тяжелой воды D_2O и газаносителя азота N_2 . Несмотря на то что тяжелая вода хорошо изучена и активно применяется в атомной промышленности, кривые насыщения в литературе представлены скудно. В настоящей работе применяется зависимость следующего вида [17]:

$$\ln[p_s(T)] = A + BT^{-1} + C \ln(T) + DT, \quad (16)$$

где T — температура, К; $A = 95.700020$, $B = -8439.470752$, $C = -13.486506$, $D = 0.012010$ — коэффициенты.

Точность представления кривой насыщения оказывает сильное влияние на результаты расчетов, так как входит в определение степени пересыщения, от которой, в свою очередь, экспоненциально зависит скорость нуклеации.

Помимо этого, для тяжелой и обычной воды используются зависимости теплоты парообразования, коэффициента поверхностного натяжения, вязкости и теплопроводности от температуры, принимаемые согласно [16–18].

Описание геометрических характеристик каналов

В настоящей работе рассматриваются два варианта сопловых каналов. Геометрические характеристики первого соответствуют работам [14, 27, 28], далее такое сопло обозначается как Tanimura (по фамилии первого руководителя проекта). Второй вариант взят из работы [15], далее он обозначается как G2 Lamanna. Характеристики сопл

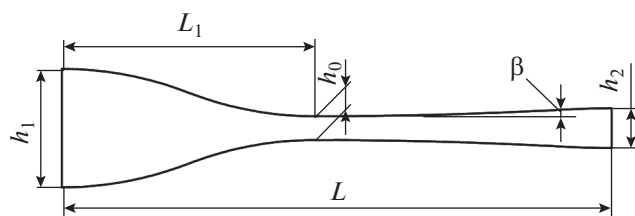


Рис. 2. Общий вид профиля сопла G2 Lamanna. L – общая длина сопла; L_1 – его длина до критического сечения; h_0, h_1, h_2 – высота критического, входного и выходного сечения соответственно; β – угол раскрытия

представлены в табл. 1. Чтобы не перегружать работу однотипными схемами, на рис. 2 приводится только общий вид сопла G2 Lamanna.

Описание сетки

Для исключения влияния на результаты расчетов разбиения модели на элементы проводилось исследование сеточной сходимости в целом по сгущению сетки и в области высоких градиентов. Для двумерных моделей приоритетными элементами при построении сеток выбраны прямоугольники (hexa-сетка), для трехмерных моделей применялись призматические и полиэдрические элементы. Описываемые сетки не содержат призматического подслоя вблизи стенок, так как в рассматриваемых режимах число Рейнольдса $Re \leq 600$, однако дополнительные исследования с учетом призматического подслоя проводились и его влияния не выявлено.

Таблица 1. Геометрические характеристики профилей сопел

Параметр	Сопло	
	G2 Lamanna	Tanimura
Общая длина L , м	0.5000	0.1590
Длина до критического сечения L_1 , м	0.2156	0.0640
Высота, м:		
критического сечения h_0	0.0200	0.0430
входного сечения h_1	0.1000	0.0050
выходного сечения h_2	0.0336	0.0075
Угол раскрытия β , град	1.3800	0.0106

Таблица 2. Начальные условия на входе в каждое из сопел Tanimura и G2 Lamanna

Профиль сопла	Полное давление на входе p_0 , Па	Температура смеси на входе T_0 , К	Объемная доля пара в потоке, %
Tanimura	60400	298.15	2
G2 Lamanna	87600	296.60	3

Граничные и начальные условия

В качестве граничных условий для одномерного решения на входе в сопло задаются полное давление смеси, ее температура и массовая доля пара в смеси. Для решения задач в двумерной и трехмерной постановках, осуществляемого с помощью CFD-пакета, на входе задается условие pressure-inlet с указанием полного давления смеси, ее температуры и объемной доли пара, на выходе – pressure-outlet.

Параметры на входе в сопло для каждого профиля приведены в табл. 2.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В ходе настоящего исследования были получены распределения относительного давления p/p_0 (где p_0 – начальное давление на входе в сопло), температуры смеси T , степени пересыщения s , а также объемной доли образовавшегося конденсата как вдоль центральной оси x , так и на плоскости, ограниченной контуром расчетной области.

Сравнение с экспериментом для сопла Tanimura

В работах [14, 27] приведены распределения относительного давления p/p_0 и температуры смеси T , по которым проводится сопоставление с расчетными данными. Для сравнения полученные в настоящей работе результаты расчетов и экспериментальные данные [14, 27] представлены на рис. 3.

Если исходить из приведенных на рисунке распределений, то можно говорить о хорошем количественном согласовании данных. Так, в зоне активной конденсации, которая характеризуется локальным повышением давления и температуры, отличие от экспериментальных данных незначительное – не превышает 3%.

При рассмотрении кинетики конденсации важную роль играют также такие характеристики конденсационного аэрозоля, как степень пересыщения, скорость нуклеации, числовая плотность капель в единице массы и скорость роста капель. Так как экспериментальных зависимостей для указанных характеристик в литературе найдено не было, предлагается сравнение одномерной (на рис. 3 позиция 1) и двумерной (позиция 2) постановок. С учетом того что задачи решаются разны-

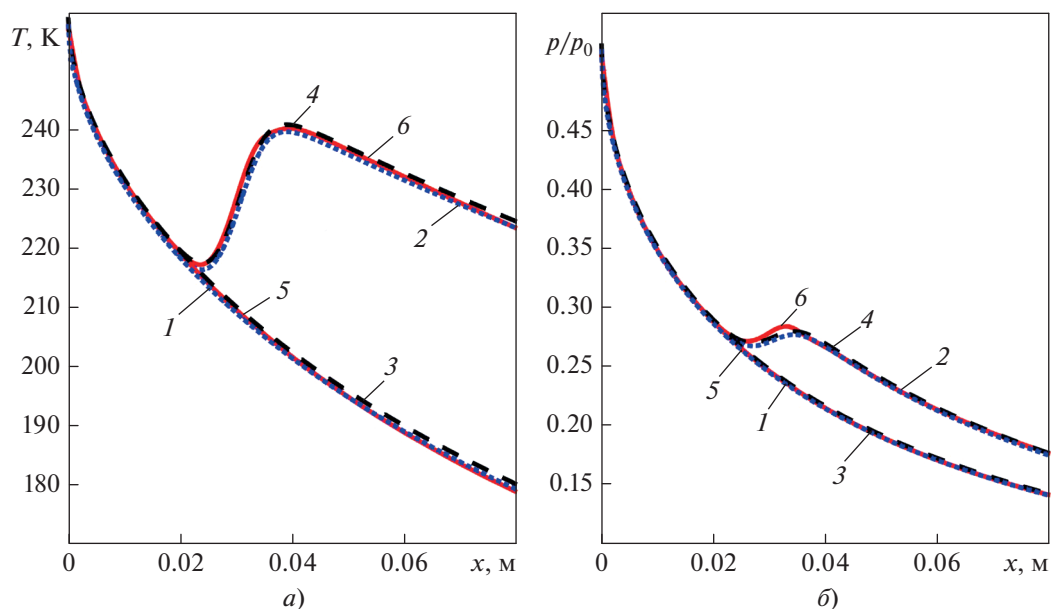


Рис. 3. Распределения температуры (а) и относительного давления p/p_0 (б) вдоль центральной линии.

а: 1, 2 – экспериментальные данные; 3, 4 – одномерные расчеты; 5, 6 – двумерные расчеты.

б: 1, 3, 5 – изоэнтропийное (так называемое замороженное) течение без фазовых переходов; 2, 4, 6 – течение с конденсацией

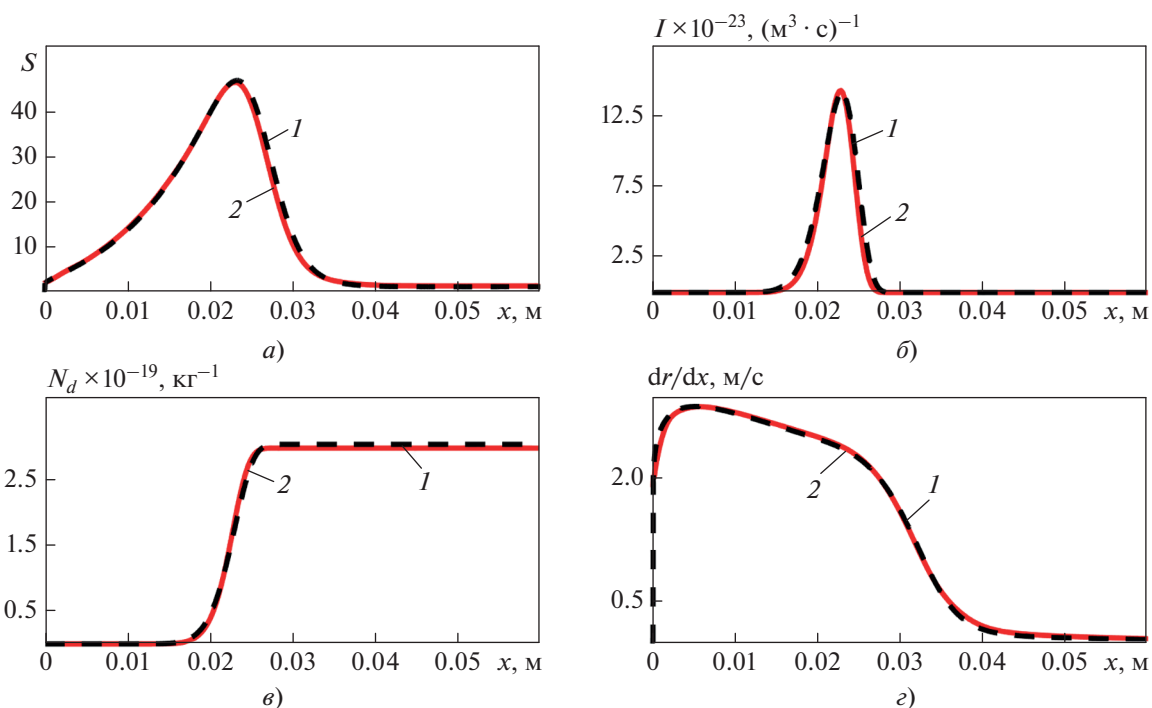


Рис. 4. Распределения степени пересыщения (а), скорости нуклеации (б), числовой плотности капель (е) и скорости роста капель (з) вдоль центральной линии

ми методами, при должном согласовании данных такое сравнение также можно считать верификацией. На рис. 4 представлены эти зависимости. Результаты для двумерной постановки указаны вдоль центральной оси сопла.

На графике числовой плотности в единице массы (см. рис. 4, е) видно, что количество капель на некотором расстоянии от критического сечения сопла увеличивается, а затем становится постоянным. Это обусловлено, во-первых, тем, что

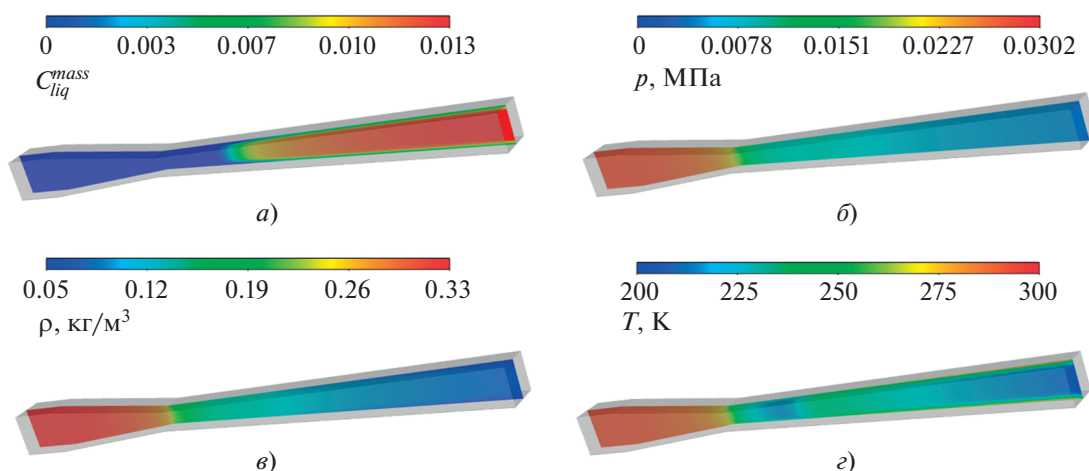


Рис. 5. Распределения массовой доли конденсата (а), давления (б) и плотности смеси (в) и температуры (г) в продольном сечении трехмерной модели сопла Tanimura

активная конденсация прекращается и капли перестают образовываться, однако они продолжают расти, а во-вторых, в настоящей работе коагуляция, т.е. слияние капель, не моделируется, поэтому их количество не уменьшается при слиянии.

Для дополнительной проверки работоспособности модуля проведены также расчеты с использованием трехмерной модели сопла Tanimura. На рис. 5 показаны распределения температуры, давления, плотности смеси и массовой доли капель в продольном сечении сопла. При сравнении результатов с двумерной постановкой установлено их полное совпадение, ввиду чего графики распределений не приводятся.

Сравнение с экспериментом для сопла Lantana

Чтобы провести дополнительную верификацию модуля, специально разработанного для решения кинетического уравнения для функции распределения капель по размерам, следует рассмотреть также экспериментальные данные из [15]. В этой работе в большей степени представлены расчетные значения величин, поэтому сравнение проводится для имеющихся в ней экспериментальных данных по распределению температуры вдоль центральной линии сопла, а также по максимальному радиусу капель для приведенных режимов работы сопла.

На рис. 6 видно, что, как и для профиля сопла Tanimura, наблюдается хорошее качественное и количественное согласование данных, причем лучше согласуются данные, относящиеся к области начала активной конденсации (область, в которой температура потока начинает резко расти), а также к переходу к изоэнтропийному процессу, т.е. к периоду после завершения конденсации. Максимальное различие данных составляет не

более 3%, что сопоставимо с погрешностью численного метода.

Для наглядности на рис. 7 представлены распределения плотности смеси, давления, температуры и массовой доли жидкости (конденсата) на плоскости, ограниченной контуром расчетной области. Видно, что распределения величин соответствуют физической картине процесса. Так, показаны области повышенного давления и температуры, которые соответствуют зонам активной конденсации с последующим снижением их значений.

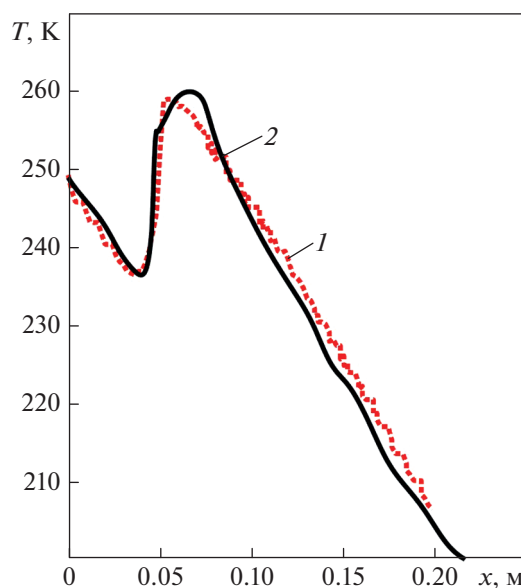


Рис. 6. Распределение температуры вдоль центральной линии сопла. 1 – экспериментальные данные; 2 – результат CFD-моделирования

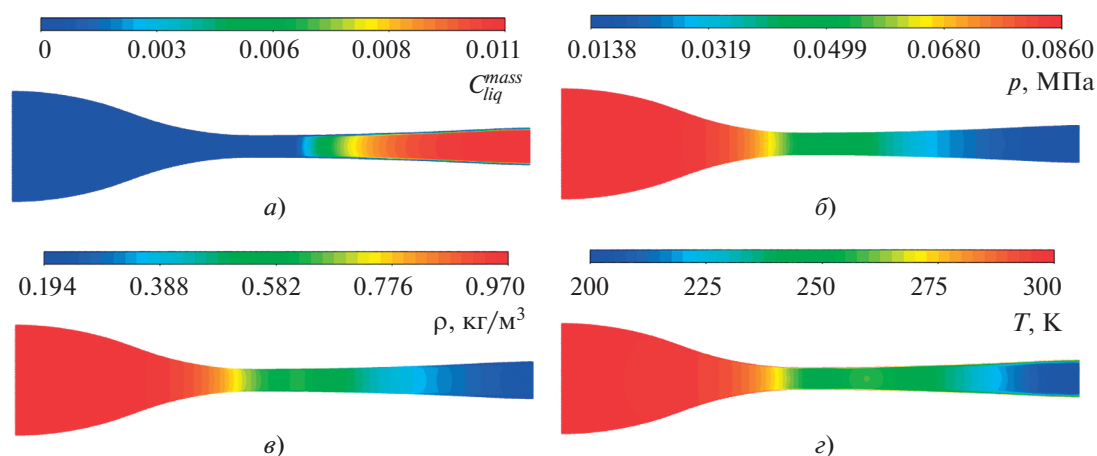


Рис. 7. Распределения массовой доли конденсата (*a*), давления (*б*) и плотности смеси (*в*) и температуры (*г*) на плоскости, ограниченной контуром расчетной области

Была произведена также серия расчетов для сравнения с экспериментальными данными по максимальному радиусу капель. С учетом того что подобного рода значения тяжело представить графически, не перегружая работу однотипными графиками и распределениями, полученные результаты сведены в табл. 3. Для каждого расчета в качестве исходных данных задавались соответствующие давления на входе в сопло, начальные температуры, а также начальная степень пересыщения, для чего модуль был модернизирован. Так, по ней пересчитывалось начальное давление пара.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ РОСТА КАПЛИ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ КОНДЕНСАЦИОННОГО АЭРОЗОЛЯ

Одна из задач настоящего исследования заключается в определении степени влияния роста капель на термогазодинамику процесса. Для этого было проведено два расчета: в первом учитывалось только образование капель, без их роста, а во втором — и образование капель, и их рост. Первый расчет обусловлен пренебрежением фазой

роста капель при моделировании процесса объемной конденсации, как, например, в [29].

Чтобы не перегружать статью однотипными графиками, сравнение проведено по температуре потока (рис. 8, *a*), а также по значениям массового источникового члена (рис. 8, *б*) для двух вариантов — с учетом роста капель и без него, так как эти распределения более наглядно показывают влияние роста капель на термодинамику процесса.

По представленным распределениям видно, что, во-первых, различие между массовыми источниковыми членами с учетом и без учета роста капель составляет не менее двух порядков, при этом максимум источникового члена без учета роста капель равен приблизительно $4.50 \text{ кг}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$, в то время как с его учетом — примерно $108.50 \text{ кг}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$. Во-вторых, учет роста капель сильно влияет на термодинамику процесса, что видно по распределениям температуры: поток вследствие тепловыделения при конденсации нагрелся существенно (отличие составило не менее 12 К), так как, как было сказано ранее, источниковый член в уравнении энергии — это произве-

Таблица 3. Максимальный радиус капель при различных расчетных режимах

Давление p_0 , Па	Температура T_0 , К	Начальная степень пересыщения s_0	Максимальный радиус капель, нм	
			эксперимент	CFD-расчет
87500	296.6	1.19	162	166
87700	296.9	1.51	167	170
86300	296.8	1.10	160	163
86300	296.9	1.30	161	164
86500	296.9	1.29	160	164

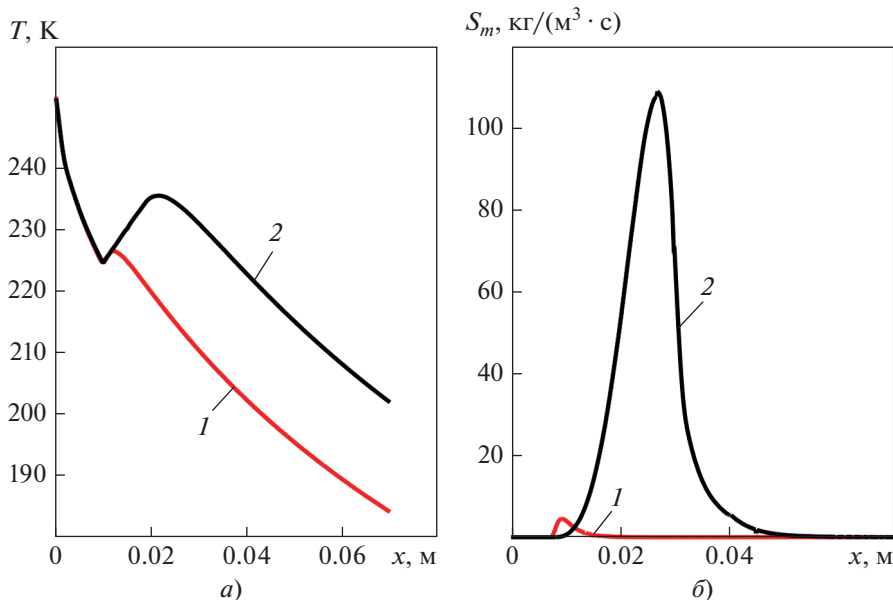


Рис. 8. Распределения температуры (а) и объемного источника массы (б) вдоль центральной линии сопла. 1 – без учета роста капель; 2 – с его учетом

дение массового источникового члена на теплоту парообразования.

Таким образом, можно сделать вывод, что необходимо учитывать не только образование капель, но и их рост. Более того, в некоторых задачах, как, например, в рассматриваемой, вкладом образования капель, очевидно, можно пренебречь.

ВЫВОДЫ

1. Специальный расчетный модуль “Объемная конденсация” модифицирован с учетом пользовательских скаляров, которые разрешаются с помощью расчетного CFD-пакета и для которых вычисляются источниковые члены. Благодаря этому были существенно повышены устойчивость и точность решения, а также уменьшено расчетное время. В модуль были добавлены также автоматическое определение пространственной размерности задачи и выбор типа решателя (стационарный или нестационарный), что позволило сократить количество версий модуля.

2. На основании сравнения расчетных величин, полученных при решении задач в одно-, двух- и трехмерной постановках в стационарном и нестационарном приближениях, и экспериментальных данных сторонних авторов модуль был верифицирован на примере решения задачи об объемной конденсации при сверхзвуковом расширении парогазовой смеси в сопле. Были получены распределения давления, температуры, плотности, степени пересыщения, числовой плотности капель, среднего размера капель и массовой доли

конденсата как в сечениях, так и вдоль центральной линии рассматриваемых сопел. Стоит отметить, что необходимо учитывать не только образования капель, но и их рост, так как именно этот процесс оказывает основное влияние на термодинамику потока. Решения в двумерном и трехмерном вариантах постановки задачи совпадают, что позволяет сделать вывод о возможности применения двумерных постановок для решения подобных задач с простым профилем каналов.

3. Модифицированный модуль, интегрируемый в CFD-пакет, открывает широкие возможности для исследования объемной конденсации в каналах сложной формы, в том числе как при вращении отдельных элементов устройства, так и при турбулентности и теплообмене. Однако на данный момент требуется переход от однотемпературного приближения к двухтемпературному для того, чтобы снять весьма существенное ограничение по количеству примеси.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сидоров А.А., Ястребов А.К. Влияние геометрических характеристик канала и свойств парогазовой смеси на объемную конденсацию при течении в сопле // Теплоэнергетика. 2018. № 1. С. 68–76. <https://doi.org/10.1134/S004036361801006X>
2. Сидоров А.А., Ястребов А.К. Интеграция модуля численного решения кинетического уравнения в CFD-пакет для задачи объемной конденсации при истечении парогазовой смеси через сопло // Вестник Дагестан. гос. техн. ун-та. Техн. науки. 2021.

- Т. 48. № 1. С. 65–75.
<https://doi.org/10.21822/2073-6185-2021-48-1-65-75>
3. **Дейч М.Е., Филиппов Г.А.** Газодинамика двухфазных сред. 2-е изд. М.: Энергоиздат, 1981.
 4. **Дейч М.Е., Филиппов Г.А.** Двухфазные течения в элементах теплоэнергетического оборудования. М.: Энергоатомиздат, 1987.
 5. **Плачендовский Д.И.** Исследование двухфазных режимов работы криогенных турбодетандеров: дис. ... канд. техн. наук. М., 1981.
 6. **Корценштейн Н.М., Самуйлов Е.В., Ястребов А.К.** Новый метод моделирования объемной конденсации пересыщенного пара // ТВТ. 2009. Т. 49. Вып. 1. С. 89–100.
 7. **Kortsenshteyn N.M., Samuilow E.V.** Heat and mass transfer in processes of condensation relaxation of supersaturated vapor // Heat Transfer Res. 2007. V. 38. Is. 6. P. 541–552.
<https://doi.org/10.1615/HeatTransRes.v38.i6.60>
 8. **Kortsenshteyn N.M., Yastrebov A.K.** Interphase heat transfer during bulk condensation in the flow of vapor–gas mixture // Int. J. Heat Mass Transfer. 2012. V. 55. Is. 4. P. 1133–1140.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.09.059>
 9. **Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т.** Кинетика конденсации шлама в канале МГД-генератора. Квазистационарная конденсация // ТВТ. 1983. Т. 21. Вып. 6. С. 1197–1205.
 10. **Гидаспов В.Ю.** Математическое моделирование высокоскоростных многофазных течений с физико-химическими превращениями: дис. ... докт. техн. наук. М., 2019.
 11. **Temperature** and gas-phase composition measurements in supersonic flows using tunable diode laser absorption spectroscopy: The effect of condensation on the boundary-layer thickness / S. Tanimura, Y. Zvinevich, B.E. Wyslouzil, M. Zahniser, J. Shorter, D. Nelson, V. McManus // J. Chem. Phys. 2005. V. 122. Is. 19. P. 194304.
<https://doi.org/10.1063/1.1900084>
 12. **Laksmono H., Tanimura S., Wyslouzil B.E.** Methanol nucleation in a supersonic nozzle // J. Chem. Phys. 2011. V. 135. Is. 7. P. 074305.
<https://doi.org/10.1063/1.3624756>
 13. **Monomer**, clusters, liquid: an integrated spectroscopic study of methanol condensation / H. Laksmono, S. Tanimura, H.C. Allen, G. Wilemski, M.S. Zahniser, J.H. Shorter, D.D. Nelson, J.B. McManus, B.E. Wyslouzil // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. V. 13. Is. 14. P. 5855–5871.
<https://doi.org/10.1039/C0CP02485F>
 14. **Nonisothermal** droplet growth in the free molecular regime / H. Pathak, K. Mullick, S. Tanimura, B.E. Wyslouzil // Aerosol Sci. Technol. 2013. V. 47. Is. 12. P. 1310–1324.
<https://doi.org/10.1080/02786826.2013.839980>
 15. **Lamanna G.** On nucleation and droplet growth in condensing nozzle flows: Phd Thesis. Technische Universiteit Eindhoven, 2000.
<https://doi.org/10.6100/IR539104>
 16. **Crabtree A.** Thermophysical properties of saturated light and heavy water for advanced neutron source applications. Washington: Oak Ridge National Laboratory, 1993.
 17. **Herrig S., Thol M.** A reference equation of state for heavy water // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2018. V. 47. Is. 4.
<https://doi.org/10.1063/1.5053993>
 18. **Варгафтик Н.Б.** Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972.
 19. **Pope S.B.** Turbulent flows. N.Y.: Cornell University, 2000.
<https://doi.org/10.1017/CBO9780511840531>
 20. **ANSYS Fluent Theory Guide.** ANSYS, Inc., 275 Technology Drive Canonsburg, PA 15317, 2013. [Электрон. ресурс.] <https://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent>
 21. **Лабунцов Д.А., Ягов В.В.** Механика двухфазных систем: учеб. пособие для вузов. М.: Изд-во МЭИ, 2000.
 22. **Корценштейн Н.М., Петров Л.В.** Численное моделирование объемной конденсации при истечении парогазовой смеси через сопло // Коллоид. журн. 2017. Т. 79. № 3. С. 276–283.
<https://doi.org/10.7868/S0023291217030065>
 23. **Корценштейн Н.М., Ястребов А.К.** Объемная конденсация в запыленном парогазовом потоке с учетом распределения пылинок по размерам // Коллоид. журн. 2016. Т. 78. № 4. С. 444–449.
<https://doi.org/10.7868/S0023291216040108>
 24. **Свид. РФ № 2022660181** о гос. регистрации программы для ЭВМ. Специальный расчетный модуль “Объемная конденсация” / А.А. Сидоров, А.К. Ястребов. Оpubл. 31.05.2022.
 25. **Стернин Л.Е.** Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. М.: Машиностроение, 1974.
 26. **Исследование** процесса конденсации в соплах с большой степенью расширения / В.Ю. Гидаспов, И.Э. Иванов, В.С. Назаров, Ф.А. Малашин, И.А. Крюков // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2018. Т. 19. Вып. 2. С. 2–17.
<https://doi.org/10.33257/PhChGD.19.2.737>
 27. **The structure** of D₂O-nonane nanodroplets / H. Pathak, A. Obeidat, G. Wilemski, B.E. Wyslouzil // J. Chem. Phys. 2014. V. 140. Is. 22. P. 224318.
<https://doi.org/10.1063/1.4881423>
 28. **Tanimura S., Wyslouzil B.E.** Binary nucleation rates for ethanol/water mixtures in supersonic Laval nozzles // J. Chem. Phys. 2010. V. 133. Is. 17. P. 174305.
<https://doi.org/10.1063/1.3493488>
 29. **Li J.-D.** CFD simulation of water vapour condensation in the presence of non-condensable gas in vertical cylindrical condensers // Int. J. Heat Mass Transfer. 2013. V. 57. Is. 2. P. 708–721.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.10.051>

Simulation of Bulk Condensation in a Flow of a Vapor–Gas Mixture through a Nozzle by CFD-Methods Using a Special Computational Module

A. A. Sidorov^{a, *} and A. K. Yastrebov^a

^a National Research University Moscow Power Engineering Institute, Moscow, 111250 Russia

*e-mail: AlexSid-MPEI@yandex.ru

Abstract—Bulk condensation belongs to the most widely used thermodynamic processes. However, the complexity of its simulation often reduces numerical studies to a one-dimensional formulation of the problem and simple channel shapes. This work presents a bulk condensation computational module based on the solution to the kinetic equation by the method of moments for the droplet size distribution function. The module has been upgraded considering the user-defined scalars (UDS) and integrated into the CFD-package. This module upgrading has considerably improved the stability and accuracy of the solution and also has cut down the computational time. The developed condensation model and its implementation using the module have been verified for one-, two-, and three-dimensional formulations in steady state and unsteady approximations against two sets of third-party experimental data by an example of a solution to the problem of bulk condensation during supersonic expansion of a vapor–gas mixture in a nozzle. This yielded the distributions of pressure, temperature, density, degree of supersaturation, mass fraction of condensate, number density, and average droplet size both in cross sections and along the centerline of the examined nozzles. An important conclusion has been confirmed that we should consider not only the formation of droplets but also their growth since it is this process that has the main effect on the thermogasdynamics of the process. The solutions of the 2D and 3D problems are almost identical, which allows us to conclude that 2D formulations may be employed for solving similar problems with a simple channel geometry.

Keywords: bulk condensation, nucleation, vapor–gas mixture, thermogasdynamics, finite volume simulation, CFD-methods, numerical methods, kinetic equation