

DOI 10.15507/2079-6900.25.202304.361-374

Оригинальная статья

ISSN 2079-6900 (Print)

ISSN 2587-7496 (Online)

УДК 519.688

Численная модель формирования паро-воздушно-углеводородных смесей

А. Р. Яппарова, Т. В. Маркелова, П. В. Снытников

Институт катализа СО РАН (г. Новосибирск, Российская Федерация)

Аннотация. Использование энергоустановок на основе топливных элементов является перспективным направлением в получении электроэнергии. Однако на пути их широкого внедрения стоит проблема высокой стоимости и доступности используемого топлива. Для решения этой проблемы разрабатываются эффективные системы, работающие на дизельном топливе. Основная задача заключается в создании устройства — топливного процессора, которое бы конвертировало дизельное топливо в водородосодержащий газ. Устройство состоит из нескольких блоков: форсунка для впрыска жидкого топлива в перегретый пар в виде капель, зона смешения и испарения дизельного топлива, область подачи воздуха, реакционная зона, включающая катализатор. Подбор температуры для протекания процесса испарения должен быть произведен таким образом, чтобы, с одной стороны, жидкие капли не попадали на поверхность катализатора, а, с другой стороны, не запускались газофазные реакции в зоне смешения. Для разработки такого устройства требуется не только проведение лабораторных экспериментов и исследование катализатора процесса, но и оптимизация основных физических характеристик устройства, таких как его линейные размеры, рабочая температура, расходы реагентов и многих других. Проведение такого исследования невозможно без использования методов математического моделирования. Это существенно сокращает сроки и стоимость работ. В данной работе представлена цифровая модель устройства для формирования паро-воздушно-углеводородной смеси в осесимметричной постановке. Изучена динамика дозвукового многофазного течения водяного пара, несущего капли жидкого дизельного топлива, процесс испарения и смешивания дизельного топлива с водяным паром и воздухом. Математическая модель была реализована в пакете ANSYS Fluent (академическая лицензия ССКЦ СО РАН).

Ключевые слова: дизельное топливо, многофазное течение, испарение топлива, формирование воздушно - углеводородных смесей, ANSYS Fluent

Для цитирования: Яппарова А.Р., Маркелова Т.В., Снытников П.В. Численная модель формирования паро-воздушно-углеводородных смесей // Журнал Средневолжского математического общества. 2023. Т. 25, № 4. С. 361–374. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.25.202304.361-374>

Об авторах:

Яппарова Айгуль Раухатовна, инженер, Институт катализа СО РАН (630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, д. 5), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8424-8104>, a.yapparova@g.nsu.ru

Маркелова Тамара Валерьевна, ведущий инженер, Институт катализа СО РАН (630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, д. 5), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9920-0923>, matamara@gmail.com



Снытников Павел Валерьевич, заведующий Отделом гетерогенного катализа, руководитель Центра НТИ "Водород как основа низкоуглеродной экономики", Институт катализа СО РАН (630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, д. 5), доктор химических наук, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5057-3187>, pvsnyt@catalysis.ru

Original article

MSC2020 76-10

Numerical model of vapor-air-diesel autothermal reformer

A. R. Yapparova, T. V. Markelova, P. V. Snytnikov

Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

Abstract. The use of fuel cell power plants is a promising area in the generation of electricity. The path to their widespread use is hindered by their high cost and the availability of the fuel used. To solve this problem, effective energy conversion systems operating on diesel fuel are being developed. The main goal is to create a device (a fuel processor), which would convert diesel fuel into a hydrogen-containing gas. The device consists of several components: a nozzle for injecting liquid fuel having the form of drops into superheated steam, a mixing and vaporization zone for diesel fuel, an air supply area, and a reaction zone including a catalyst. The selection of temperature for the vaporization process should be made in such a way that, on the one hand, liquid droplets do not come into contact with the catalyst surface, and, on the other hand, gas-phase reactions are not initiated in the mixing zone. Developing such a device requires not only conducting laboratory experiments and studying the process catalyst, but also optimizing the basic physical parameters of the device. These parameters are its linear dimensions, operational temperature, reactant flow rates, and many others. Carrying out such a study is impossible without using methods of mathematical modeling. This significantly reduces the time and cost of work. This paper presents a digital model of an air-hydrocarbon mixture generator in an axisymmetric formulation. The dynamics of subsonic multiphase flow of water vapor carrying drops of liquid diesel fuel, the process of diesel fuel evaporation and mixing with water vapor and air are studied. The mathematical model is implemented in the ANSYS Fluent package (academic license of SSCC SBRAS). A series of calculations for various mixture feed temperatures are performed to optimize the main parameters. For the established optimal temperature, modeling of the mixture mixing process with air is carried out.

Keywords: diesel fuel, multiphase flow, fuel vaporization, formation of air-hydrocarbon mixtures, ANSYS Fluent

For citation: A. R. Yapparova, T. V. Markelova, P. V. Snytnikov. Numerical model of vapor-air-diesel autothermal reformer. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*. 25:4(2023), 361–374. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.25.202304.361-374>

About the authors:

Aigul R. Yapparova, Engineer, Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (5 Lavrentiev Av., Novosibirsk 630090, Russia), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8424-8104>, a.yapparova@g.nsu.ru

Tamara V. Markelova, Leading Engineer, Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (5 Lavrentiev Av., Novosibirsk 630090, Russia), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9920-0923>, matamara@gmail.com

Pavel V. Snytnikov, Head of Department Heterogeneous catalysis, Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (5 Lavrentiev Av., Novosibirsk 630090, Russia), Dr.Sci. (Chemical), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5057-3187>, pvsnyt@catalysis.ru

1. Введение

Повышение сырьевой и экологической эффективности переработки ископаемых ресурсов связано с применением топливных элементов, а также технологий для производства и хранения водорода, и признано текущей основой мирового производства энергии.

Внедрение новых технологий всегда требует параллельного развития соответствующей инфраструктуры, что обычно является сдерживающим фактором, поэтому одним из решений является применение гибридных систем, которые сочетают в себе устоявшиеся технологии и устройства с дополнительными системами на основе топливных элементов [1].

В последнее время в мире создается много разработок концепций реакторов и катализаторов автотермического риформинга. Автотермический риформинг дизельного топлива - это каталитический процесс, протекающий при температуре 970–1170 К, в котором молекулы углеводородов смешиваются с водяным паром и воздухом, образуя газообразную реакционную смесь, которая попадает на катализатор для дальнейших преобразований.

Для разработки реактора переработки дизельного топлива в синтез газ с каталитическим модулем, описание которого можно найти в работах [1; 2; 3], требуется смоделировать часть реактора, где происходит испарение топлива и смешение пародизельной смеси с воздухом. Также необходимо изучить влияние температуры стенок и начальной температуры подаваемого водяного пара на эффективность протекания упомянутых процессов, чтобы найти оптимальный диапазон.

В литературе встречаются описания аналогичных устройств. Например в работах [4, 5] описывается разработка концепции реактора и катализатора для автотермического риформинга жидких углеводородных топлив. В [6] представлены результаты работы по оптимизации смесеобразования дизельного топлива, описываются эксперименты по визуализации потока. Это говорит об актуальности создания доступной цифровой модели для такого типа процессов и проведения численных экспериментов. Для реализации математической модели процессов был выбран пакет ANSYS Fluent, так как в нём уже реализованы подходящие модели для данной задачи. Кроме того, применяемый в ANSYS Fluent метод конечных объёмов позволяет находить не только оптимальные физические параметры, но и изучать влияние формы и размеров устройства на его эффективность, что необходимо при проектировании.

Целью работы является разработка методики математического моделирования двухфазного течения (газ-капли жидкости) с учетом процессов смешения, испарения, массо- и тепло-переноса. В результате проведенных расчетов для упрощенной постановки задачи была найдена оптимальная начальная температура пара, изучен процесс теплопереноса при испарении. Полученные данные были использованы в модели для более сложной геометрии и с учетом подачи воздуха в устройство, изучен процесс смешения.

2. Математическая модель

Расчетная область симметрична относительно одной центральной оси, поэтому моделирование проводилось в двумерной постановке. Общий вид в поперечном сечении изображён на Рис. 2.1.

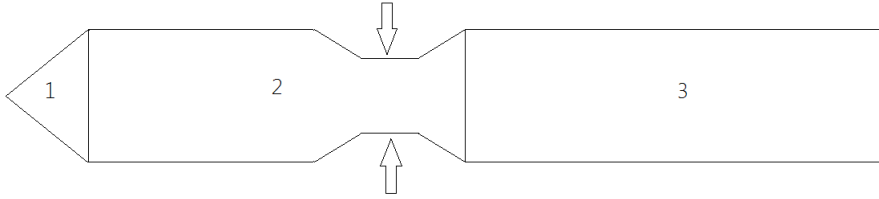


Рис. 2.1. Общий вид реактора

Fig. 2.1. General view of the reactor

Весь реактор можно условно разделить на три части. В области "1" происходит распыление водяного пара и жидкого топлива форсункой. Затем эта смесь, уже равномерно смешанная, входит в область "2", где жидкое топливо испаряется в газообразное, а также смешивается с водяным паром и воздухом, который входит по периметру, куда показывают стрелки. Далее эта смесь попадает в реакционную зону, обозначенную на рисунке цифрой "3". Далее в работе мы представляем математическую модель и результаты численного моделирования для области "2".

Различают два подхода к математическому моделированию многофазных потоков: подход Эйлера-Лагранжа и подход Эйлера-Эйлера [7]. В первом несущая фаза рассматривается как непрерывная, для нее записывают уравнения Навье-Стокса, а дисперсная фаза моделируется путем отслеживания траекторий частиц, пузырьков или капель через поле потока. Дисперсная фаза может обмениваться импульсом, массой и энергией с непрерывной фазой. Для каждого отдельного объекта записываются уравнения переноса. Во втором подходе каждая фаза моделируется как сплошная среда. Мы используем первый подход, так как доля капель мала по сравнению с объемом несущего газа, а также для более корректного моделирования процесса испарения капель жидкости.

2.1. Модель сплошной среды

Уравнения Навье-Стокса и уравнение энергии для идеального сжимаемого газа:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v} = S_m,$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla \cdot p + \nabla \cdot \tau,$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(\sum_j h_j \vec{J}_j + \tau \cdot \vec{v} \right),$$

где ρ – плотность газа, \vec{v} – скорость газа, S_m – источник массы, добавляемой в непрерывную фазу из дисперсной второй фазы за счет испарения капель жидкости, p – давление,

ρE – полная энергия, τ – тензор вязкой диссипации, $\tau = \mu((\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T) - \frac{2}{3}\nabla\cdot\vec{v}I)$, μ – динамическая вязкость, I – единичная матрица, $h_j = \int_{T_{ref}}^T c_{p,j}dT$, $T_{ref} = 298.15K$, $c_{p,j}$ – удельная теплоёмкость j -го вещества, \vec{J}_j – диффузный поток j -го вещества.

Диффузный поток j -го вещества \vec{J}_j вычисляется как

$$\vec{J}_j = -\rho D_{j,m}\nabla Y_j - D_{T,j}\frac{\nabla T}{T},$$

где Y_j – массовая доля j -го вещества, $D_{j,m}$ – коэффициент массовой диффузии j -го вещества в смеси, $D_{T,j}$ – коэффициент термической диффузии.

$$D_{j,m} = \frac{1 - X_j}{\sum_{i,i\neq j} (X_i/D_{ji})}$$

$$D_{T,j} = -2.59 \cdot 10^{-7} T^{0.659} \left[\frac{M_{w,j}^{0.511} X_j}{\sum_{i=1}^N M_{w,i}^{0.511} X_i} - Y_j \right] \cdot \left[\frac{\sum_{i=1}^N M_{w,i}^{0.511} X_i}{\sum_{i=1}^N M_{w,i}^{0.489} X_i} \right],$$

$$D_{ij} = 0.00188 \frac{\left[T^3 \left(\frac{1}{M_{w,i}} + \frac{1}{M_{w,j}} \right) \right]^{1/2}}{p_{abs} \sigma_{ij}^2 \Omega_D},$$

где $\Omega_D = \Omega_D(T_D^*)$ – интеграл диффузионных столкновений, являющийся мерой взаимодействия молекул в системе,

$$T_D^* = \frac{T}{(\epsilon/k_B)_{ij}}, \quad (\epsilon/k_B)_{ij} = \sqrt{(\epsilon/k_B)_i(\epsilon/k_B)_j}, \quad \sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j)$$

k_B – постоянная Больцмана, p_{abs} – абсолютное давление, коэффициенты потенциала Леннарда-Джонса i -го вещества σ_i – минимум потенциальной кривой и $(\epsilon/k_B)_i$ – глубина потенциальной ямы.

2.2. Модель дискретной фазы

Вычисляем траектории частицы дискретной фазы путем интегрирования баланса сил на частице, который записан в лагранжевой системе отсчета. Приравниваем инерцию частицы к силам, действующим на частицу, запишем это следующим образом:

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(\vec{v} - \vec{u}_p) \tag{2.1}$$

где $F_D(\vec{v} - \vec{u}_p)$ – сила сопротивления на единицу массы частицы, $F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24}$, \vec{v} – скорость непрерывной фазы, \vec{u}_p – скорость частицы, μ – вязкость непрерывной фазы, ρ – плотность непрерывной фазы, ρ_p – плотность частиц, d_p – диаметр частиц, $Re = \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{v}|}{\mu}$ – число Рейнольдса для частиц.

Интегрирование по времени уравнения (2.1) дает скорость частицы в каждой точке траектории, а сама траектория прогнозируется следующим выражением:

$$\frac{dx}{dt} = u_p. \tag{2.2}$$

Заметим, что уравнения (2.1) и (2.2) - обыкновенные дифференциальные уравнения, и их можно объединить и переписать как

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p}(u - u_p).$$

В нашей модели частицы это капли жидкого топлива, состоящие из нескольких веществ. Масса частицы m_p представляет собой сумму масс компонентов:

$$m_p = \sum_i m_i$$

Плотность частицы ρ_p усреднена по объёму:

$$\rho_p = \left(\sum_i \frac{m_i}{m \rho_i} \right)^{-1}$$

Скорость испарения многокомпонентных капель рассчитывается как сумма скоростей испарения отдельных компонентов. Для модели испарения, контролируемой диффузией, скорость испарения компонента определяется следующим выражением:

$$\frac{dm_i}{dt} = A_p M_{w,i} k_{c,i} (C_{i,c} - C_{i,\infty})$$

где m_i - масса i -го компонента капли, $k_{c,i}$ - коэффициент массопередачи компонента, A_p - площадь поверхности частицы, $M_{w,i}$ - молярная масса i -го компонента, $C_{i,c}$ и $C_{i,\infty}$ - концентрация i -го вещества на поверхности и в объеме капли соответственно.

Когда общее давление пара на поверхности капли превышает давление в ячейке, многокомпонентная капля находится в режиме кипения, и применяется уравнение для скорости кипения:

$$\frac{dm_i}{dt} = x_i \frac{\pi d_p k_\infty}{c_{p\infty}} (2 + 0.6 Re_d^{1/2} Pr^{1/3}) \ln(1 + B_{T,i})$$

где x_i - объёмная доля i -го компонента, d_p - диаметр капли, k_∞ - теплопроводность непрерывной фазы, $c_{p\infty}$ - удельная теплоемкость непрерывной фазы, $B_{T,i} = \frac{c_{p\infty}(T_\infty - T_p)}{h_{vap,i}}$ - коэффициент теплопередачи Сполдинга для i -го компонента, $h_{vap,i}$ - тепло испарения i -го компонента, задаётся константой.

Уравнение энергии для многокомпонентной частицы записывается следующим образом:

$$m_p c_p \frac{dT}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \sum_i \frac{dm_i}{dt} h_{vap,i}$$

где h - коэффициент теплопередачи, c_p - теплоемкость капли, $\sigma = 5,67 * 10^{-8}$ Вт/м² К⁴ - постоянная Стефана-Больцмана.

3. Результаты численного моделирования

Математическая модель реализована с помощью пакета для компьютерного моделирования гидродинамики ANSYS Fluent, для решения системы уравнений в частных производных использовалась неявная схема расщепления.

3.1. Тестовые расчеты для течения в круглой трубе

Для тестирования реализации модели были проведены расчеты в осесимметричной постановке для круглой трубы с радиусом 21 мм и длиной 100 мм. Вид расчётной области представлена на рисунке 3.1. В ANSYS Meshing была построена прямоугольная

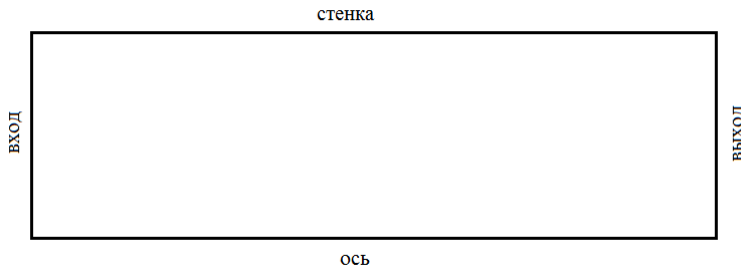


Рис. 3.1. Расчетная область

Fig. 3.1. Computational domain

сетка, с размером ячейки 1 мм.

В расчётную область входит смесь топлива в виде капель и водяного перегретого пара. Топливо состоит из трёх веществ: гексадекана ($C_{16}H_{34}$), ортоксилола (C_8H_{10}), 1-метилнафталина ($C_{11}H_{10}$). Температура входящих капель составляет 350 К. Используемые в модели физические величины для веществ, представленные в таблицах 3.1 и 3.3, были взяты из баз данных ANSYS Fluent и NIST, в таблице 3.2 из [8, 9]. В расчётной области не происходят химические реакции. Течение ламинарное.

Таблица 3.1. Данные веществ в жидком агрегатном состоянии

Table 3.1. Data of substances in liquid aggregate state

Вещество Species	Температура испарения, К Evaporation temperature, K	Молярная масса, кг/моль Molar mass, kg/mol	Теплоемкость, кДж/кг·К Heat capacity, kJ/kg·K	Тепло испарения, кДж/кг Latent heat of vaporization, kJ/kg
$C_{16}H_{34}$	554	226.448	2215	232.307
C_8H_{10}	409.3	106.165	1710.55	277.000
$C_{11}H_{10}$	515	142.1971	1578.02	326.529

Граничные условия:

- на входе заданы массовые расходы веществ. Расход гексадекана составляет 105 г/ч, ортоксилола – 28 г/ч, 1-метилнафталина – 7 г/ч, водяного пара – 350 г/ч;
- температура смеси варьировалась в диапазоне 660 – 770 К;

Таблица 3.2. Коэффициенты потенциала Леннарда-Джонса
Table 3.2. Lennard-Jones parametrs

Вещество Species	Минимум потенциальной кривой, А L-J Characteristic length, A	Глубина потенциальной ямы, К L-J Energy parametr, K
$C_{16}H_{34}$	7.77	810.8
C_8H_{10}	5.97	556.18
$C_{11}H_{10}$	6.20	612.0
H_2O	2.605	572.4
<i>air</i>	3.711	78.6

Таблица 3.3. Данные веществ в газообразном агрегатном состоянии
Table 3.3. Data of substances in a gaseous state of aggregation

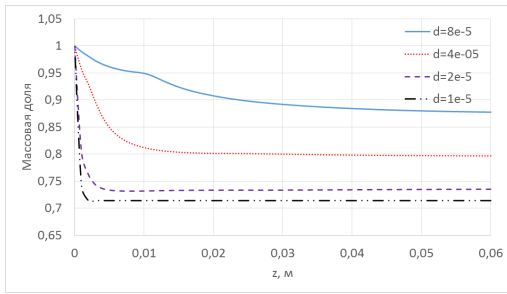
Вещество Species	Теплоемкость, кДж/кг·К Heat capacity, kJ/kg·K	Энтальпия, кДж/моль Enthalpy, kJ/mol
$C_{16}H_{34}$	2263	-374.9
C_8H_{10}	214.02	-49.66
$C_{11}H_{10}$	2206.29	108

- на стенке задано условие непротекания и нулевой тепловой поток;
- для дисперсной фазы диаметр капель варьировался от 10^{-5} м до $8 \cdot 10^{-5}$ м;
- на выходе задано условие свободного вытекания при давлении 1 атм.

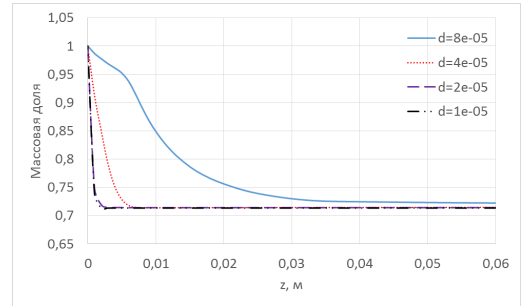
Начальные условия:

- постоянное распределение плотности водяного пара во всей расчетной области;
- постоянная температура 350 К во всей расчетной области;
- давление восстанавливается из давления, заданного на выходе.

На Рис. 3.2 представлены результаты численных экспериментов с варьированием диаметра капли от 10^{-5} до $8 \cdot 10^{-5}$ мм для двух температур водяного пара 660 К и 723 К на входе. Из графиков распределения массовой доли водяного пара видно, что при температуре 660 К входящего пара, диаметр капель оказывает существенное влияние, крупные капели не испаряются полностью, что крайне нежелательно. Из Рис. 3.3 видно, что для крупных капель температура на оси трубы падает сильнее, что приводит к прекращению испарительного процесса. Для случая с начальной температурой пара 723 К, для большинства рассчитанных диаметров капель жидкость испаряется полностью на расстоянии менее 0.01 м от входа.



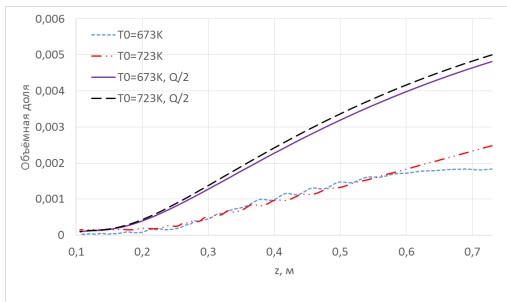
Температура на входе 660 К
Inlet temperature 660 K



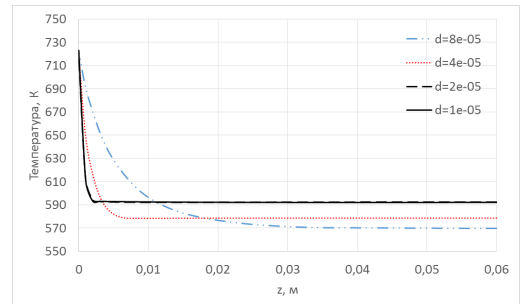
Температура на входе 723 К
Inlet temperature 723 K

Рис. 3.2. Зависимость массовой доли водяного пара в смеси вдоль оси для различных диаметров капель

Fig. 3.2. Dependence of the mass fraction of water vapor in the mixture along the axis for different droplet diameters



Температура на входе 660 К
Inlet temperature 660 K



Температура на входе 723 К
Inlet temperature 723 K

Рис. 3.3. Температура смеси вдоль оси для различных диаметров капель

Fig. 3.3. Temperature of the mixture along the axis for different droplet diameters

3.2. Математическое моделирование формирователя паро-воздушно-углеводородных смесей

Для моделирования процесса смешения пара и углеводородов с воздухом был выбран вид конструкции, описанный в литературе [4]. На Рис. 3.4 схематично изображено устройство для испарения топлива и смешения его с воздухом, которое также имеет осевую симметрию. Общая его длина составляет 730 мм.

Сетка была построена в ANSYS Meshing, характерный размер ячеек — 1 мм.

Начальные и граничные условия аналогичны указанным в предыдущем разделе. Расход воздуха составляет 1008 г/ч, температура воздуха 350 К.

Была проведена серия расчётов для температур входящего водяного пара $T_0 = 673\text{K}$ и $T_0 = 723\text{K}$ с разными расходами подаваемых газов, представлены сравнительные расчеты для расходов, уменьшенных в два раза для каждого из веществ. На Рис. 3.5 слева приведены линии тока скорости для указанных расходов, $T_0 = 673\text{K}$. Скорости и температура двух сталкивающихся потоков отличаются почти в два раза, что затрудняет их проникновение друг в друга.

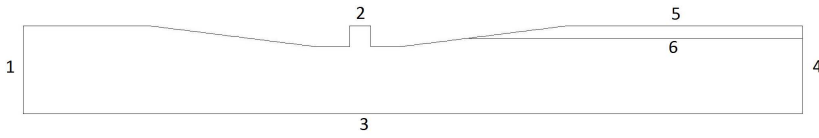
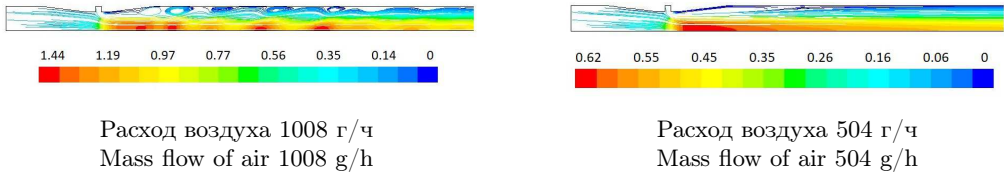


Рис. 3.4. Расчётная область: 1 - вход водяного пара и топлива, 2 - вход воздуха, 3 - ось симметрии, 4 - выход, 5 - стенка

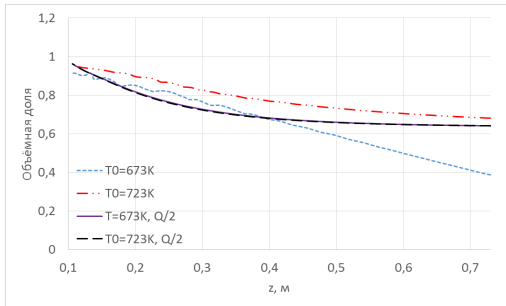
Fig. 3.4. Computational domain: 1 - inlet for water vapor and fuel, 2 - inlet for air, 3 - axis, 4 - outlet, 5 - wall



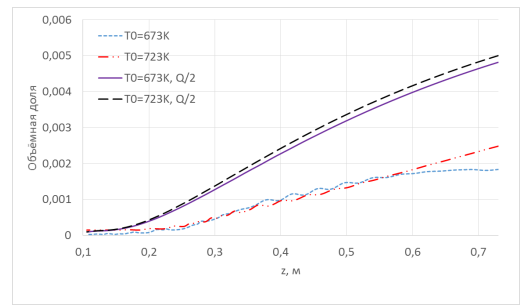
Расход воздуха 1008 г/ч
Mass flow of air 1008 g/h

Расход воздуха 504 г/ч
Mass flow of air 504 g/h

Рис. 3.5. Линии тока скорости м/с
Fig. 3.5. Pathlines of velocity m/s



Объемная доля воздуха
Volume fraction of air



Объемная доля $C_{16}H_{34}$
Volume fraction of $C_{16}H_{34}$

Рис. 3.6. Объемная доля вещества вдоль линии "6" Рис. 3.4
Fig. 3.6. Volume fraction of a substance along the line "6" Fig. 3.4

Из Рис. 3.6 видно, что при высоких скоростях потоков температура влияет на процесс смешения, причем уменьшение разницы температур позволяет получить на выходе более однородную смесь. Уменьшение расходов в два раза позволит сократить в устройстве зону смешения в два раза. Полученные результаты могут быть использованы для дальнейшего проектирования устройства.

3.3. Оптимизация математической модели формирователя паро-воздушно-углеводородных смесей

Для оптимизации процесса смешения воздуха с паро-углеводородной смесью варьировалась ширина входного отверстия, отмеченного на Рис. 3.4 цифрой "2", а также

угол наклона относительно оси симметрии. В предыдущих случаях ширина входа "2" воздуха составлял 5 мм, в данном разделе приведены расчёты для случаев, когда ширина равняется 2 мм и 1 мм, а угол наклона 60° . Расход воздуха составляет 1008 г/ч, температура входящего водяного пара $T_0 = 673\text{K}$.

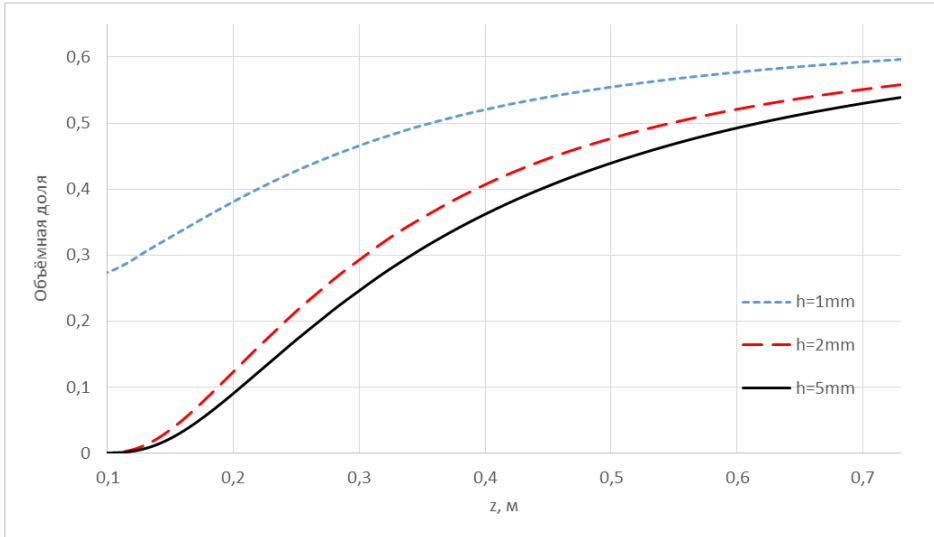


Рис. 3.7. Объёмная доля воздуха вдоль оси симметрии

Fig. 3.7. Volume fraction of air along the axis of symmetry

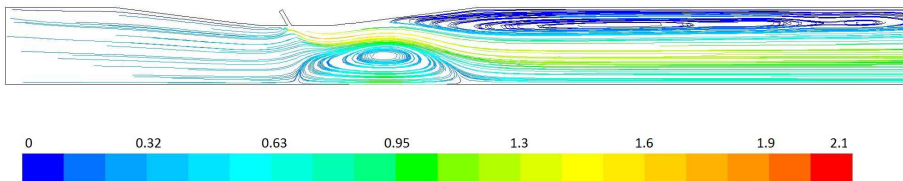


Рис. 3.8. Линии тока скорости м/с

Fig. 3.8. Pathlines of velocity m/s

Из Рис. 3.7 и 3.8 видно, что сужением входа "2" до 1 мм можно добиться такого распределения поля скорости, что смешивание будет проходить гораздо ближе к месту ввода воздуха.

4. Выводы

Создана математическая модель двухфазного течения газа и капель дизельного топлива с учетом их испарения. Траектории движения капель и их испарение в потоке водяного пара моделируются в рамках лагранжева подхода. Численная модель реализована в пакете Ansys Fluent (лицензия ССКЦ СОРАН).

В результате численных экспериментов были определены оптимальные расходы для реагентов. Также было изучено влияние диаметра капель и температуры подаваемого пара на эффективность процесса испарения и дальнейшего смешения с воздухом. Показано что уменьшение диаметра капель позволяет существенно снизить температуру пара, что важно для предотвращения химических реакций в зоне смешения. Также установлены расстояние от входа, на котором процесс испарения гарантированно завершен, и длина зоны смешения, которые можно использовать для дальнейшего проектирования устройства.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (грант № 19-19-00257-П).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zazhigalov S.V., Rogozhnikov V.N., Snytnikov P.V., Potemkin D.I., Simonov P.A., Shilov V.A., Ruban N.V., Kulikov A.V., Zagoruiko A.N., Sobyenin V.A. Simulation of diesel autothermal reforming over $Rh/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_{2-\delta} - \eta - Al_2O_3/FeCrAl$ wire mesh honeycomb catalytic module // Chem. Eng. Process. Process Intensif. 2020. Vol. 150. 107876. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107876>
2. Zazhigalov S.V., Shilov V.A., Rogozhnikov V.N., Potemkin D.I., Sobyenin V.A., Zagoruiko A.N., Snytnikov P.V. Modeling of hydrogen production by diesel reforming over $Rh/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_{2-\delta} - \eta - Al_2O_3/FeCrAl$ wire mesh honeycomb catalytic module // Catalysis Today. 2021. Vol. 378. pp. 240–248. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107876>
3. Ruban N.V., Rogozhnikov V.N., Stonkus O.A., Emelyanov V.A., Pakharukova V.P., Svintitskiy D.A., Zazhigalov S.V., Zagoruiko A.N., Snytnikov P.V., Sobyenin V.A., Potemkin D.I. A comparative investigation of equimolar $Ni-$, $Ru-$, $Rh-$ and $Pt-$ based composite structured catalysts for energy-efficient methane reforming // Fuel. 2023. Vol. 352. 128973. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.128973>
4. Pasel J., Samsun R.C., Tschauder A., Peters R., Stolten D. Advances in autothermal reformer design // International Journal of Hydrogen Energy. 2017. Vol. 198. pp. 88–98. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.04.055>
5. Pasel J., Remzi C.S., Meissner J., Tschauder A., Peters R. Recent advances in diesel autothermal reformer design // International Journal of Hydrogen Energy. 2020. Vol. 45, No. 3. pp. 2279–2288. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.137>
6. Por Z., Pasel J., Tschauder A., Dahl R., Peters R., Stolten D. Optimised mixture formation for diesel fuel processing // Fuel Cells. 2008. Vol. 8. Pp. 129–137 DOI: <https://doi.org/10.1002/fuce.200700062>
7. Вараксин А.Ю. Гидрогазодинамика и теплофизика двухфазных потоков: проблемы и достижения (Обзор) // ТВТ. 2013. Т. 51, вып. 3. С. 421–455
8. Tahery R., Modarress H. Lennard-Jones energy parameter for pure fluids from scaled particle theory // Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering. 2007. Vol. 26, No. 2. Pp. 1–8 DOI: <https://doi.org/10.30492/ijcce.2007.7647>

9. Huber M. Preliminary Models for Viscosity, Thermal Conductivity, and Surface Tension of Pure Fluid Constituents of Selected Diesel Surrogate Fuels. Gaithersburg, MD: Technical Note National Institute of Standards and Technology, 2017. 62 p. DOI: <https://doi.org/10.6028/NIST.TN.1949>

Поступила 22.08.2023; доработана после рецензирования 04.10.2023;
принята к публикации 24.11.2023

Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

REFERENCES

1. S.V. Zazhigalov, V.N. Rogozhnikov, P.V. Snytnikov, D.I. Potemkin, P.A. Simonov, V.A. Shilov, N.V. Ruban, A.V. Kulikov, A.N. Zagoruiko, V.A. Sobyenin, "Simulation of diesel autothermal reforming over $Rh/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_{2-\delta} - \eta - Al_2O_3/FeCrAl$ wire mesh honeycomb catalytic module", *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, **150** (2020), 107876. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107876>
2. S.V. Zazhigalov, V.A. Shilov, V.N. Rogozhnikov, D.I. Potemkin, V.A. Sobyenin, A.N. Zagoruiko, P.V. Snytnikov, "Modeling of hydrogen production by diesel reforming over $Rh/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_{2-\delta} - \eta - Al_2O_3/FeCrAl$ wire mesh honeycomb catalytic module", *Catalysis Today*, **378** (2021), 240–248. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.11.015>
3. N.V. Ruban, V.N. Rogozhnikov, O.A. Stonkus, V.A. Emelyanov, V.P. Pakharukova, D.A. Svintsitskiy, S.V. Zazhigalov, A.N. Zagoruiko, P.V. Snytnikov, V.A. Sobyenin, D.I. Potemkin, "A comparative investigation of equimolar Ni -, Ru -, Rh - and Pt -based composite structured catalysts for energy-efficient methane reforming", *Fuel*, **352** (2023). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.128973>
4. J. Pasel, R.C. Samsun, A. Tschauder, R. Peters, D. Stolten, "Advances in autothermal reformer design", *Applied Energy*, **198** (2017), 88–98. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.04.055>
5. J. Pasel, C.S. Remzi, J. Meissner, A. Tschauder, R. Peters, "Recent advances in diesel autothermal reformer design", *International Journal of Hydrogen Energy*, **45:3** (2020), 2279–2288. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.137>
6. Z. Por?, J. Pasel, A. Tschauder, R. Dahl, R. Peters, D. Stolten, "Optimised mixture formation for diesel fuel processing", *Fuel Cells*, **8** (2008), 129–137. DOI: <https://doi.org/10.1002/face.200700062>
7. A.Y. Varaksin, "Fluid dynamics and thermal physics of two-phase flows: Problems and achievements", *High Temp.*, **51** (2013), 377–407. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0018151X13030073>
8. R. Tahery, H. Modarress, "Lennard-Jones Energy Parameter for Pure Fluids from Scaled Particle Theory", *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, **26:2** (2007), 1–8. DOI: <https://doi.org/10.30492/ijcce.2007.7647>