

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССООБМЕНА В ЗАДАЧАХ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ НАГРЕВА КРИОГЕННЫХ ПРОДУКТОВ В ГОРИЗОНТАЛЬНОМ СОСУДЕ

*Е.С. Солдатов¹, А.В. Богомолов²*¹Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр РАН,
г. Санкт-Петербург, Российская Федерация²Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» РАН,
г. Москва, Российская Федерация

Рассмотрены проблемные вопросы моделирования испарения-конденсации при численном исследовании нестационарного тепломассообмена в криогенных процессах. Приведена постановка задачи расчета параметров многофазного турбулентного течения в замкнутой области при аппроксимации свободной поверхности методом объема жидкости, использование которого позволяет отслеживать вертикальное перемещение границы раздела фаз в процессе изменения параметров криопродукта с течением времени. Приведено описание моделей испарения-конденсации, пригодных для использования в нестационарных расчетах течений в замкнутой области совместно с методом объема жидкости. Продемонстрирована возможность использования модели испарения-конденсации Ли и модели, основанной на законе диффузии частиц, применительно к расчетам на несложных расчетных сетках. Представлены результаты расчетов изменения давления криогенного продукта в процессе бездренажного хранения при использовании различных моделей кипения-конденсации. Полученные результаты моделирования использованы при накоплении базы данных параметров хранения в системе дистанционного мониторинга состояния криогенного оборудования. Данные представляют собой расчетные значения времени хранения для различных исходных значений давления и уровня жидкости в сосуде, причем каждому значению внешнего теплового потока будет соответствовать конкретное расчетное время бездренажного хранения.

Ключевые слова: тепломассообмен; бездренажное хранение; вычислительная гидродинамика; модель испарения-конденсации; танк-контейнер.

Введение

На предприятиях топливно-энергетического комплекса, машиностроения, химической и нефтехимической промышленности, металлургии, пищевой промышленности, а также на объектах здравоохранения и сельского хозяйства актуальными являются вопросы повышения безопасности и снижения потерь при хранении и транспортировке криопродуктов [1, 2]. В этом аспекте ключевую роль играет точное прогнозирование параметров теплофизических процессов в закрытом сосуде при нагреве, в частности, таких криопродуктов, как жидкий кислород, жидкий азот, жидкий аргон, жидкий водород и сжиженный природный газ (СПГ) [3].

Для получения информации по изменению с течением времени давления хранения и уровня жидкости при нагреве криопродукта в сосуде могут применяться следующие методы:

- экспериментальное исследование, в том числе с использованием метода обобщенных переменных [4, 5];

- численное исследование с применением методов вычислительной гидродинамики (Computational Fluid Dynamics – CFD) [6, 7];
- обработка статистических данных.

Применение численного исследования для получения необходимых массивов данных позволяет существенно сократить объем экспериментальных исследований. Также при компьютерном моделировании имеется возможность получить поля распределения интересующих параметров на многочисленных режимах, для которых отсутствуют статистические данные, в частности, для аварийных режимов, тогда как проведение экспериментов на этих режимах является опасным или экономически нецелесообразным [8].

Базовыми трудностями при использовании CFD-моделирования являются необходимость введения упрощений модели, в том числе в части описания компонентного состава жидкой и паровой фаз, ограниченный спектр режимов работы сосуда, для которых удастся получить корректное решение, а также повышенные требования к вычислительным ресурсам [9, 10].

Ключевой проблемой использования моделей массопереноса в задачах CFD-моделирования является необходимость калибровки математических моделей по экспериментальным или эмпирическим данным, что является комплексной трудоемкой задачей, которая также требует серьезных вычислительных ресурсов. При этом в научной литературе и в руководствах пользователей универсальных программных комплексов для CFD-моделирования практически отсутствуют рекомендации по использованию тех или иных моделей испарения-конденсации при исследовании тепломассообмена в криогенных процессах. В связи с обозначенными причинами широкое использование численного исследования с использованием CFD в инженерных расчетах процессов холодильной и криогенной техники в настоящее время серьезно затруднено. Применение в основном ограничивается отдельными случаями для решения различных научно-исследовательских задач.

Тем не менее развитие методов моделирования многофазных течений с учетом массообмена и рассмотрение вопросов, связанных с их практическим применением, являются залогом успешного решения проблем при бездренажном хранении криопродуктов.

1. О задаче нестационарного расчета многофазного течения в закрытом криогенном сосуде

Для получения полей распределения интересующих параметров криопродукта в замкнутой области сосуда требуется проведение расчета многофазного турбулентного течения в нестационарной постановке.

При моделировании двухфазного течения при наличии четкой границы раздела фаз «жидкость-газ» целесообразно применение метода объема жидкости (Volume-of-fluid method – VOF) [11, 12]:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{V}_q) \right] = S_{\alpha q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}), \quad (1)$$

где α, ρ – соответственно, объемная доля фазы и плотность, V_q – вектор скорости фазы q , m_{qp}, m_{pq} – массоперенос, соответственно, из фазы q в фазу p и из фазы p в фазу q , $S_{\alpha q}$ – источниковый член (по умолчанию равен нулю).

Для замыкания турбулентности используется модель турбулентности $k-\varepsilon$, хорошо зарекомендовавшая себя при расчетах течений в замкнутых объемах, где необходим учет естественной конвекции и сжимаемости среды [13].

В качестве граничного условия указывается плотность теплового потока через стенку. В частности, нормативными значениями для танк-контейнеров с экранно-вакуумной теплоизоляцией можно считать значения удельного теплового потока через изоляцию 1...5 Вт/м², значения 6...10 Вт/м² соответствуют повышенным значениям теплопритока, >10 Вт/м² – существенная потеря вакуума и аварийные режимы эксплуатации [14].

2. Модели массообмена в многофазных течениях при аппроксимации свободной поверхности методом объема жидкости

Одной из моделей массообмена, применяемых в случае аппроксимации границы раздела фаз методом объема жидкости VOF, является модель испарения-конденсации Шраге (Schrage), основанная на предположении, что поле скоростей молекул в набегающем потоке пара может быть получено непосредственно из распределения в удаленной области. При этом тангенциальная составляющая скорости со стороны паровой области принимается равной соответствующей тангенциальной составляющей со стороны жидкости. Уравнение модели массопереноса в этом случае запишется следующим образом [15]:

$$\dot{m} = \left(\frac{2\sigma}{2 - \sigma} \right) \left(\frac{M}{2\pi R} \right)^{1/2} \left(\frac{p_i}{T_i^{1/2}} - \frac{p_v}{T_v^{1/2}} \right), \quad (2)$$

где M – молярная масса жидкости, R – универсальная газовая постоянная, p_i – давление в пограничной зоне, p_v – давление пара, σ – коэффициент аккомодации.

Значения коэффициентов аккомодации для различных веществ, а также в зависимости от температуры и давления могут варьироваться в диапазоне от 0 до 1. Опубликовано существенное количество эмпирических данных с подборками значений коэффициентов аккомодации для воды, воздуха и других веществ, включая жидкие металлы. Однако в научной литературе содержится крайне мало сведений по рекомендуемым значениям коэффициентов аккомодации для криогенных продуктов. При этом в случаях с моделированием плоской границы раздела фаз в стационарном криогенном сосуде рекомендуется использовать значения коэффициента аккомодации, не превышающие значение 0,1 [16].

Другой применимой совместно с методом VOF моделью массообмена является модель испарения-конденсации Ли (Lee) [17]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_v \rho_v) + \nabla \cdot (\alpha_v \rho_v \vec{V}_v) = \dot{m}_{lv} - \dot{m}_{vl}, \quad (3)$$

при этом интенсивность испарения-конденсации определяется выражениями:

$$\dot{m}_{lv} = K_e \alpha_l \rho_l \frac{T_l - T_s}{T_s}, \quad (T_l > T_s \text{ процесс испарения}), \quad (4)$$

$$\dot{m}_{vl} = K_e \alpha_v \rho_v \frac{T_s - T_v}{T_s}, \quad (T_v < T_s \text{ процесс конденсации}), \quad (5)$$

где α_l, α_v – объемная доля, соответственно, жидкой и паровой фазы, ρ_l, ρ_v – плотность, соответственно, жидкой и паровой фазы, T_l, T_v – температура, соответственно,

жидкой и паровой фазы, T_s – температура насыщения, определяемая в зависимости от давления, V_v – скорость паровой фазы.

Эмпирический коэффициент K_e в выражениях (4) и (5) требует подбора для согласования с экспериментальными данными. В научной литературе его часто называют коэффициентом или параметром релаксации, его значения варьируются от 0 до 1 [18]. С точки зрения физического смысла коэффициент K_e можно рассматривать как относительную частоту пересечений молекулами границы раздела фаз «жидкость-пар».

Продолжаются попытки разработать эффективные методы автоматизации процедуры подбора коэффициентов релаксации, с целью избежать трудоемкого этапа ручной калибровки модели и повысить точность результатов вычисления параметров процессов испарения и конденсации [19, 20].

3. Исследование течения многокомпонентной смеси с использованием модели испарения на основе закона диффузии частиц

При относительно небольших скоростях испарения продукта можно применять модель испарения-конденсации, основанную на законе диффузии Фика с учетом эффекта стефановского течения.

Обе фазы продукта принимаются многокомпонентными смесями, включающими в свой состав химически не реагирующие друг с другом компоненты. Для многокомпонентной смеси уравнение переноса массовой доли запишется следующим образом [21]:

$$\frac{\delta \rho_i \alpha_i Y_{i,j}}{\delta t} + \nabla \cdot (\rho_i \alpha_i Y_{i,j} \bar{V}_i) = \nabla \cdot (\rho_i \alpha_i D_i \nabla Y_{i,j}) + S_{i,j} + m_{i,j}^{tr}, \quad (6)$$

где ρ_i – плотность i -й фазы, α_i – объемная доля i -й фазы, V_i – скорость i -й фазы, $Y_{i,j}$ – массовая доля j -го компонента в i -й фазе, D_i – массовая диффузионная способность, $S_{i,j}$ – источниковый член, $m_{i,j}^{tr}$ – характеризует перенос компонента из одной фазы в другую.

При этом принимается допущение, что фазы находятся в равновесии на границе раздела фаз, а движущей силой процесса испарения является диффузия частиц. Фазовое равновесие описывается по закону Рауля [22, 23].

Скорость испарения k -го компонента рассчитывается по формуле

$$\dot{m}_k = -\rho_v D_{v,k} \left(\frac{\partial Y_{v,k}}{\partial n} \right) \Big|_S \frac{1}{1 - Y_{v,k}^S}, \quad (7)$$

где ρ_v – плотность паровой фазы, $D_{v,k}$ – коэффициент диффузии, $Y_{v,k}$ – массовая доля k -го компонента в паровой фазе. Индекс S означает принадлежность к поверхности границы раздела фаз. При вычислении по рассматриваемой модели также требуется варьирование фактора релаксации (under-relaxation factor): при больших и не уменьшающихся с течением времени значениях невязок необходимо устанавливать пониженные значения фактора релаксации (по умолчанию он равен 1,0).

Выражение (7) применимо только при испарении одного компонента смеси, тогда как для моделирования испарения нескольких компонентов требуется применять более сложные модели [24, 25]. Ввиду относительно небольшой скорости испарения криопродукта и достаточной точности получаемых результатов моделирования при рассмотрении вопроса испарения природного газа ограничились испарением только одного компонента – метана.

4. Численное исследование процессов тепломассообмена в системе хранения сжиженного природного газа

Рассмотрен пример проведения расчета распределения температуры и давления в процессе бездренажного хранения сжиженного природного газа. Вычисления проводились в программном комплексе CFD-моделирования STAR CCM+ 2022.1 с применением модели испарения-конденсации на основе закона диффузии частиц и в программном комплексе ANSYS Fluent 2020 R1 с применением модели Ли. Исходная геометрическая модель представлена на рис. 1. Диаметр расчетной области соответствует диаметру внутреннего сосуда (без стенок) стандартного мультимодального танк-контейнера для СПГ. Ввиду отсутствия на практике значительных градиентов скорости в осевом направлении сосуда (ось Z), для упрощения постановки задачи и экономии вычислительных ресурсов расчетная область выполнена квазидвумерной.

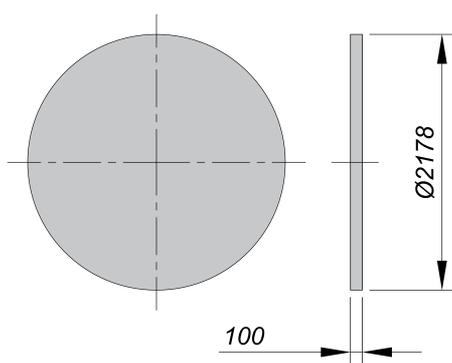


Рис. 1. Геометрическая модель

Вычисления проводились преимущественно на декартовых отсечных сетках, а также на полиэдральной расчетной сетке. На рис. 2 и 3 приведен пример декартовой расчетной сетки с уточнением в области границы раздела фаз.

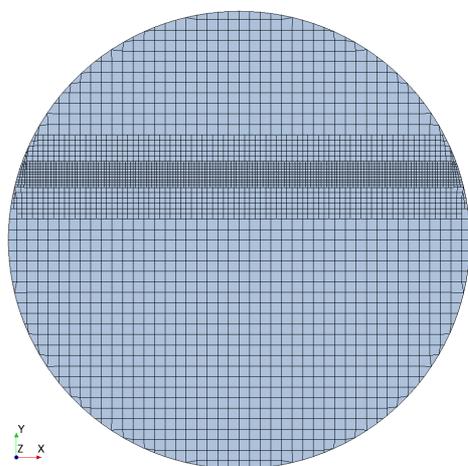


Рис. 2. Расчетная сетка с уточнением в области границы раздела фаз

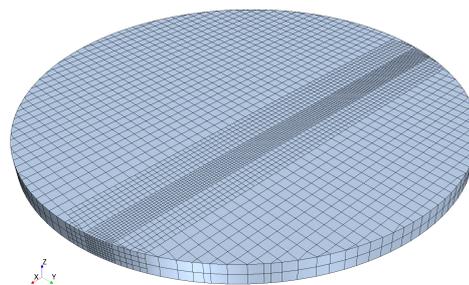


Рис. 3. Квазидвумерная дискретная модель, общий вид

Исходными данными при задании граничных условий являлись данные о нормативных значениях теплопритока через изоляцию, указанные изготовителем сосудов в технической документации.

Калибровочные расчеты для настройки модели испарения-конденсации при различных значениях удельного теплового потока к продукту через стенку необходимо проводить на дискретных моделях со сгущением сетки в области границы раздела фаз. Также могут быть использованы универсальные встроенные алгоритмы адаптивного уточнения сетки (Adaptive Mesh Refinement) [26, 27].

На рис. 4 продемонстрировано влияние естественной конвекции на температурное расслоение в жидкой фазе. Наблюдается движение нагретой жидкости вверх вдоль боковых стенок сосуда и далее, вдоль поверхности раздела фаз «жидкость-пар». На поверхности раздела жидкость течет по направлению к центру сосуда, смешиваясь с более холодной жидкостью. В результате конвективного движения в верхней части сосуда образуется слой жидкости, в котором имеется существенный градиент температуры по высоте.

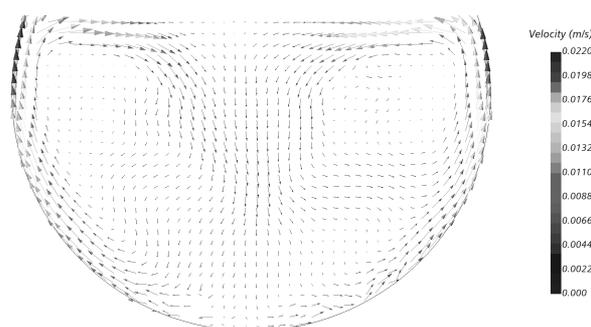


Рис. 4. Векторное поле скорости в жидкой фазе продукта

На рис. 5 представлено поле распределения температуры в паровой и жидкой фазе продукта в процессе бездренажного хранения. Полученные картины течения согласуются с опытными данными и позволяют судить о правильности оценки температурного расслоения в сосуде, напрямую влияющего на темп роста давления.

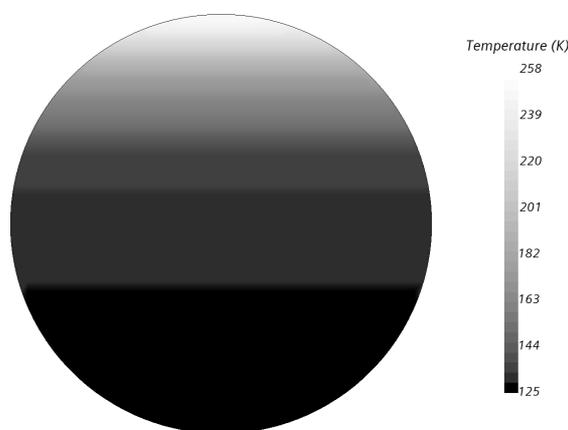


Рис. 5. Поле распределения температуры продукта в процессе хранения

На рис. 6 представлены графики изменения давления в сосуде с течением времени при различных значениях уровня жидкости в сосуде. Как видно из результатов

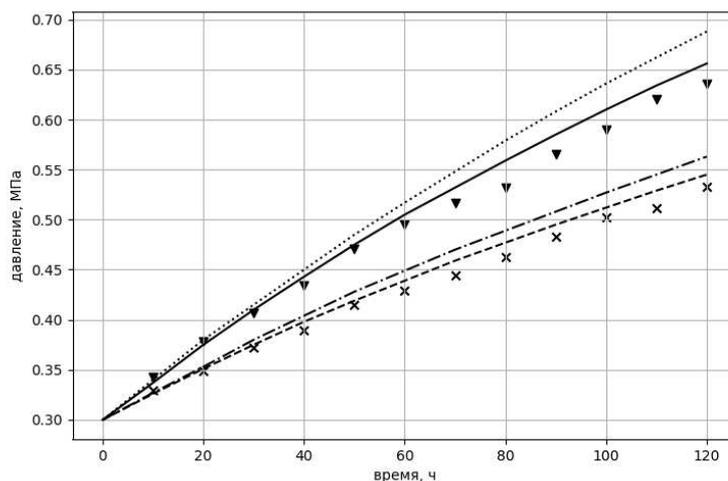


Рис. 6. Изменение давления в сосуде с течением времени (ось абсцисс – время, ч; ось ординат – давление, МПа) – расчет в STAR CCM+ по модели диффузии частиц, уровень жидкости 35 %; \cdots расчет в ANSYS Fluent по модели Ли, уровень жидкости 35 %; $-\cdot-$ расчет в STAR CCM+ по модели диффузии частиц, уровень жидкости 70 %; $-\cdot-$ расчет в ANSYS Fluent по модели Ли, уровень жидкости 70 %; \blacktriangledown эксперимент, уровень жидкости 35 %; \times эксперимент, уровень жидкости 70 %

исследования, темп роста давления при заполнении сосуда жидкостью на 35 % превышает темп роста давления при уровне заполнения сосуда на 70 %, что учитывается при формировании массива результатов моделирования за счет приведения в соответствие каждому значению давления p_k и уровня жидкости L_k соответствующего значения времени хранения:

$$\tau_k \leftrightarrow \{p_k, L_k\}.$$

По результатам моделирования производится накопление базы данных параметров хранения в виде значений времени хранения для различных исходных значений давления и уровня жидкости в сосуде, причем каждому значению внешнего теплового потока будет соответствовать конкретное расчетное время бездренажного хранения.

Заключение

Исследование показало удовлетворительную сходимость с экспериментальными данными при проведении расчетов с использованием модели испарения-конденсации Ли и модели диффузии частиц при небольших скоростях испарения криопродукта в сосуде.

Полученные результаты моделирования использованы при накоплении базы данных параметров хранения в системе дистанционного мониторинга состояния криогенного оборудования. Данные представляют собой расчетные значения времени хранения для различных исходных значений давления и уровня жидкости в сосуде, причем каждому значению внешнего теплового потока будет соответствовать конкретное расчетное время бездренажного хранения.

Дальнейшими направлениями исследований в рассматриваемой области являются:

- накопление широкой информационной базы эмпирических и экспериментальных данных по процессам бездренажного хранения важнейших криогенных продуктов;
- разработка рекомендаций, а также методов автоматизации по подбору калибровочных коэффициентов моделей массообмена;
- изучение вопроса адекватности применения известных моделей испарения-конденсации в смеси с большим количеством компонентов, в частности, для моделирования испарения СПГ с учетом присутствия тяжелых углеводородов;
- разработка методов повышения точности моделирования процессов тепломассообмена в транспортных режимах, в частности, при колебаниях сосуда с жидкостью, способствующих активному каплеобразованию.

Литература

1. Ustolina, F. Cryogenic Hydrogen Storage Tanks Exposed to Fires: a CFD Study / F. Ustolina, G. Scarponib, T. Iannaccone, V. Cozzanib, N. Paltrinieri // *Chemical Engineering Transactions*. – 2022. – V. 90. – P. 535–540.
2. Архаров, И.А. О необходимости возрождения криогенного машиностроения в России / И.А. Архаров // *Вестник Международной академии холода*. – 2023. – № 1. – С. 6–9.
3. Lee, Du-Yong. Fatigue Analysis of a 40 ft LNG ISO Tank Container / Du-Yong Lee, Jae-Sang Jo, A. Nyongesa, Won-Ju Lee // *Materials*. – 2023. – V. 16. – P. 428.
4. Kang, Minsuk. Experimental Investigation of Thermal Stratification in Cryogenic Tanks / Minsuk Kang, Juwon Kim, Hwalong You, Daejun Chang // *Experimental Thermal and Fluid Science*. – 2017. – V. 96. – P.371–382.
5. Домашенко, А.М. Тепломассообмен при неравновесном процессе нагрева термодинамически подобных криопродуктов до закритического состояния / А.М. Домашенко // *Научно-технический сборник «Вести газовой науки»*. – 2020. – Т. 1, № 42. – С. 110–123.
6. Soldatov, E. Issues of Energy-Efficient Storage of Fuel in Multimodal Transport Units / E. Soldatov, A. Bogomolov // *Smart Innovation, Systems and Technologies*. – 2022. – V. 232. – P. 393–402.
7. Ряжских, В.И. Численное моделирование термоконцентрационной конвекции в криогенных резервуарах / В.И. Ряжских, В.А. Сумин, А.А. Хвостов, А.А. Журавлев, О.А. Семенихин // *Математические методы в технике и технологиях*. – 2020. – Т. 5. – С. 17–20.
8. Huerta, F. CFD Modelling of the Isobaric Evaporation of Cryogenic Liquids in Storage Tanks / F. Huerta, V. Vesovic // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2021. – V. 176. – Article ID: 121419.
9. Navasardyan, E.S. Transient Processes in Air Separation Plants / E.S. Navasardyan, I.A. Arkharov, K.V. Mokhov // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2019. – V. 54, № 11. – P. 821–826.
10. Soldatov, E.S. Monitoring the State of Vehicles with Dangerous Goods in Cyber-Physical Systems / E.S. Soldatov, A.S. Soldatov // *Studies in Systems, Decision and Control*. – 2023. – V. 477. – P. 277–285.
11. Chen, L. Simulation of Self-Pressurization in Cryogenic Propellant Tank / L. Chen, B. Ai, S. Chen, G. Liang // *12th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics*. – Costa del Sol, 2016. – P. 1068–1073.
12. Kartuzova, O.V. CFD Modeling of Phase Change and Pressure Drop during Violent Sloshing of Cryogenic Fluid in a Small-Scale Tank / O.V. Kartuzova, M. Kassemi, Y. Umemura, K. Kinefuchi, T. Himeno // *AIAA Propulsion and Energy 2020 Forum*. – Reston, 2020. – 20 p.

13. Ряжских, А.В. Температурное поле однородной квадратной области с движущимися без ускорения смежными сторонами при граничных условиях первого рода / А.В. Ряжских, А.А. Хвостов, Е.А. Соболева, В.И. Ряжских // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2023. – Т. 15, № 1. – С. 55–62.
14. Bo, Wang. Characterization and Monitoring of Vacuum Pressure of Tank Containers with Multilayer Insulation for Cryogenic Clean Fuels Storage and Transportation / Wang Bo, Luo Ruoyin, Chen Hong // Applied Thermal Engineering. – 2021. – V. 187. – Article ID: 116569.
15. Liang, Z. Molecular simulation of steady-state evaporation and condensation: Validity of the Schrage relationships / Z. Liang, T. Biben, P. Keblinski // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2017. – V. 114. – P. 105–114.
16. Kassemi, M. Effect of Interfacial Turbulence and Accommodation Coefficient on CFD Predictions of Pressurization and Pressure Control in Cryogenic Storage Tank / M. Kassemi, O. Kartuzova // Cryogenics. – 2016. – V. 74. – P. 138–153.
17. Kharangate, C. Review of Computational Studies on Boiling and Condensation / C. Kharangate, I. Mudawar // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2017. – V. 108. – P. 1164–1196.
18. Min, Wandong Investigation of the Condensation Mass Transfer Time Relaxation Parameter for Numerical Simulation of the Thermosiphon / Wandong Min, Wei Zhong, Yuting Zhang, Xiaoling Cao, Yanping Yuan // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2023. – V. 2001, № 1. – Article ID: 123599.
19. Qiu, Guo-don Analysis on the Value of Coefficient of Mass Transfer with Phase Change in Lee's Equation / Guo-don Qiu, Z. Wu, Y. Jiang, Y. Yao // J. Harbin Inst. Technol. – 2014. – V. 46. – P. 15–19.
20. Tan, Zhoutuo. Improvement on Evaporation-Condensation Prediction of Lee Model via a Temperature Deviation Based Dynamic Correction on Evaporation Coefficient / Zhoutuo Tan, Zehan Cao, Wenxiao Chu, Qiuwang Wang, // Case Studies in Thermal Engineering. – 2023. – V. 48. – P. 103147.
21. Bracconi, M. CFD Modeling of Multiphase Flows with Detailed Microkinetic Description of the Surface Reactivity / M. Bracconi // Chemical Engineering Research and Design. – 2022. – V. 179. – P. 564–579.
22. Saufi, A. An Experimental and CFD Modeling Study of Suspended Droplets Evaporation in Buoyancy Driven Convection / A. Saufi, R. Calabria, F. Chiariello, A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, P. Massoli // Chemical Engineering Journal. – 2019. – V. 375. – P. 122006.
23. Yang, W. Predicting Evaporation Dynamics of a Multicomponent Gasoline/Ethanol Droplet and Spray Using Non-Ideal Vapour-Liquid Equilibrium Models / W. Yang, J. Xia, X. Wang, K. Wan, A. Megaritis, H. Zhao // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2021. – V. 168. – P. 120876.
24. Strotos, G. Predicting the Evaporation Rate of Stationary Droplets with the VOF Methodology for a Wide Range of Ambient Temperature Conditions / G. Strotos, I. Malgarinos, N. Nikolopoulos, M. Gavaises // International Journal of Thermal Sciences. – 2016. – V. 109. – P. 253–262.
25. Soldatov, E. Decision Support Models and Algorithms for Remote Monitoring of the Equipment State / E. Soldatov, A. Bogomolov // Proceedings of the International Scientific and Practical Conference «Information Technologies and Intelligent Decision Making Systems». – Moscow, 2021. – P. 1–8.
26. Larkin, E. Discrete Model of Mobile Robot Assemble Fault-Tolerance / E. Larkin, A. Bogomolov, A. Privalov // Interactive Collaborative Robotics. ICR 2019. Lecture Notes in Computer Science, V. 11659. Springer, Cham, – 2019. – P. 204–215.
27. Larkin, E.V. Modeling the Reliability of the Onboard Equipment of a Mobile Robot / E.V. Larkin, T.A. Akimenko, A.V. Bogomolov // Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics. – 2021. – V. 21, № 3. – P. 390–399.

Евгений Сергеевич Солдатов, кандидат технических наук, научный сотрудник, Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр РАН, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация, volshebnoekoltso@mail.ru.

Алексей Валерьевич Богомолов, доктор технических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» РАН, г. Москва, Российская Федерация, a.v.bogomolov@gmail.com

Поступила в редакцию 5 сентября 2023 г.

MSC 68U20

DOI: 10.14529/mmp230402

SIMULATION OF MASS TRANSFER IN PROBLEMS OF NUMERICAL STUDY OF HEATING OF CRYOGENIC PRODUCTS IN A HORIZONTAL VESSEL

E.S. Soldatov¹, A.V. Bogomolov²

¹Saint Petersburg Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, Russian Federation

²Federal Research Center “Informatics and Control” of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

E-mails: volshebnoekoltso@mail.ru, a.v.bogomolov@gmail.com

This paper considers the numerical modelling of evaporation-condensation in non-stationary heat and mass transfer in cryogenic processes. Calculating the parameters of a multi-phase turbulent flow in a closed region when approximating the free surface by the liquid volume method makes it possible to track the vertical displacement of the phase boundary with changing cryoprocess parameters over time. A description of evaporation-condensation models suitable for use in non-stationary calculations of flows in a closed region together with the liquid volume method are given. The possibility of using the Lee evaporation-condensation model and the model based on particle diffusion is demonstrated using calculations on simple computational grids. The change in the pressure of a cryogenic product during non-drainage storage using various models of boiling-condensation are presented. The simulation results were used in a database of storage parameters in a system for the remote monitoring of cryogenic equipment. The data are estimated storage times for different reference pressures and liquid levels in the vessel, with each external heat flux value having a specific estimated non-drainage storage time.

Keywords: heat and mass transfer; non-drainage storage; computational fluid dynamics; evaporation-condensation model; tank container.

References

1. Ustolina F., Scarponi G., Iannaccone T., Cozzani V., Paltrinieri N. Cryogenic Hydrogen Storage Tanks Exposed to Fires: a CFD Study. *Chemical Engineering Transactions*, 2022, vol. 90, pp. 535–540. DOI: 10.3303/CET2290090.
2. Arkharov I.A. On the Need to Revive Cryogenic Engineering in Russia. *Vestnik Mezhdunarodnoy akademii kholoda*, 2023, no. 1, pp. 6–9. (in Russian)
3. Lee Du-Yong, Jo Jae-Sang, Nyongesa A., Lee Won-Ju Fatigue Analysis of a 40 ft LNG ISO Tank Container. *Materials*, 2023, vol. 16, p. 428. DOI: 10.3390/ma16010428.
4. Kang Minsuk, Kim Juwon, You Hwalong, Chang Daejun Experimental Investigation of Thermal Stratification in Cryogenic Tanks. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2017, vol. 96, pp. 371–382. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2017.12.017.

5. Domashenko A.M. Heat-Mass Exchange During Non-Equilibrium Heating of Thermodynamically Similar Cryogenic Products up to an Overcritical State. *Nauchno-tekhnicheskiiy sbornik "Vesti gazovoy nauki"*, 2020, vol. 1, no. 42, pp. 110–123. (in Russian)
6. Soldatov E., Bogomolov A. Issues of Energy-Efficient Storage of Fuel in Multimodal Transport Units. *Smart Innovation, Systems and Technologies*, 2022, vol. 232, pp. 393–402.
7. Ryazhskikh V.I., Sumin V.A., Khvostov A.A., Zhuravlev A.A., Semenikhin O.A. Numerical Modeling of Thermoconcentration Convection in Cryogenic Reservoirs. *Matematicheskiye metody v tekhnike i tekhnologiyakh*, 2020, vol. 5, pp. 17–20. (in Russian)
8. Huerta F., Vesovic V. CFD Modelling of the Isobaric Evaporation of Cryogenic Liquids in Storage Tanks. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, vol. 176, article ID: 121419. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121419.
9. Navasardyan E.S., Arkharov I.A., Mokhov K.V. Transient Processes in Air Separation Plants. *Chemical and Petroleum Engineering*, 2019, vol. 54, no. 11–12, pp. 821–826.
10. Soldatov E.S., Soldatov A.S. Monitoring the State of Vehicles with Dangerous Goods in Cyber-Physical Systems. *Studies in Systems, Decision and Control*, 2023, vol. 477, pp. 277–285. DOI: 10.1007/978-3-031-33159-6_22
11. Chen L., Ai B., Chen S., Liang G. Simulation of Self-Pressurization in Cryogenic Propellant Tank. *12th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics*, Costa del Sol, 2016, pp. 1068–1073.
12. Kartuzova O.V., Kassemi M., Umemura Y., Kinefuchi K., Himeno T. CFD Modeling of Phase Change and Pressure Drop during Violent Sloshing of Cryogenic Fluid in a Small-Scale Tank. *AIAA Propulsion and Energy 2020 Forum*, Reston, 2020, 20 p. DOI: 10.2514/6.2020-3794.
13. Ryazhskikh A.V., Khvostov A.A., Soboleva Ye.A., Ryazhskikh V.I. Temperature Field of a Homogeneous Square Area with Adjacent Sides Moving without Acceleration under Boundary Conditions of the First Kind. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematics. Mechanics. Physics*, 2023, vol. 15, no. 1, pp. 55–62. (in Russian)
14. Bo W., Ruoyin L., Hong C., et al. Characterization and Monitoring of Vacuum Pressure of Tank Containers with Multilayer Insulation for Cryogenic Clean Fuels Storage and Transportation. *Applied Thermal Engineering*, 2021, vol. 187, article ID: 116569.
15. Liang Z., Biben T., Keblinski P. Molecular Simulation of Steady-State Evaporation and Condensation: Validity of the Schrage Relationships. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, vol. 114, pp. 105–114. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.06.025.
16. Kassemi M., Kartuzova O. Effect of Interfacial Turbulence and Accommodation Coefficient on CFD Predictions of Pressurization and Pressure Control in Cryogenic Storage Tank. *Cryogenics*, 2016, vol. 74, pp. 138–153. DOI: 10.1016/j.cryogenics.2015.10.018.
17. Kharangate C., Mudawar I. Review of Computational Studies on Boiling and Condensation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, vol. 108, pp. 1164–1196. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.
18. Min Wandong., Zhong Wei., Zhang Yuting., Cao Xiaoling., Yuan Yanping. Investigation of the Condensation Mass Transfer Time Relaxation Parameter for Numerical Simulation of the Thermosiphon. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023, vol. 201, no. 1, article ID: 123599. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123599.
19. Qiu Guo-don., Wu Z., Jiang Y., Yao Y. Analysis on the Value of Coefficient of Mass Transfer with Phase Change in Lee's Equation. *Journal of Harbin Institute of Technology*, 2014, vol. 46, no. 12, pp. 15–19.
20. Tan Zhoutuo, Cao Zehan, Chu Wenxiao, Wang Qiuwang. Improvement on Evaporation-Condensation Prediction of Lee Model via a Temperature Deviation Based Dynamic Correction on Evaporation Coefficient. *Case Studies in Thermal Engineering*, 2023, vol. 48, article ID: 103147. DOI: 10.1016/j.csite.2023.103147.

21. Bracconi M. CFD Modeling of Multiphase Flows with Detailed Microkinetic Description of the Surface Reactivity. *Chemical Engineering Research and Design*, 2022, vol. 179, pp. 564–579. DOI: 10.1016/j.cherd.2022.01.042.
22. Saufi A., Calabria R., Chiariello F., Frassoldati A., Cuoci A., Faravelli T., Massoli P. An Experimental and CFD Modeling Study of Suspended Droplets Evaporation in Buoyancy Driven Convection. *Chemical Engineering Journal*, 2019, vol. 375, article ID: 122006. DOI: 10.1016/j.cej.2019.122006.
23. Yang W., Xia J., Wang X.Y., Wan K.D., Megaritis A., Zhao H. Predicting Evaporation Dynamics of a Multicomponent Gasoline/Ethanol Droplet and Spray Using Non-Ideal Vapour-Liquid Equilibrium Models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, vol. 168, article ID: 120876. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120876.
24. Strotos G., Malgarinos I., Nikolopoulos N., Gavaises M. Predicting the Evaporation Rate of Stationary Droplets with the VOF Methodology for a Wide Range of Ambient Temperature Conditions. *International Journal of Thermal Sciences*, 2016, vol. 109, pp. 253–262. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2016.06.022.
25. Soldatov E., Bogomolov A. Decision Support Models and Algorithms for Remote Monitoring of the Equipment State. *CEUR Workshop Proceedings*, 2021, pp. 1–8.
26. Larkin E., Bogomolov A., Privalov A. Discrete Model of Mobile Robot Assemble Fault-Tolerance. *Interactive Collaborative Robotics: 4th International Conference, ICR 2019, Istanbul*, 2019, vol. 11659, pp. 204–215. DOI: 10.1007/978-3-030-26118-4_20
27. Larkin E.V., Akimenko T.A., Bogomolov A.V. Modeling the Reliability of the Onboard Equipment of a Mobile Robot. *Izvestiya of Saratov University. Series: Mathematics. Mechanics. Informatics*, 2021, vol. 21, no. 3, pp. 390–399. DOI: 10.18500/1816-9791-2021-21-3-390-399

Received September 5, 2023