

ŁUKASZ MAKOWSKI
WOJCIECH ORCIUCH

Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej, Politechnika Warszawska, Warszawa

Dobór warunków mieszania w kontroli przebiegu złożonych reakcji chemicznych

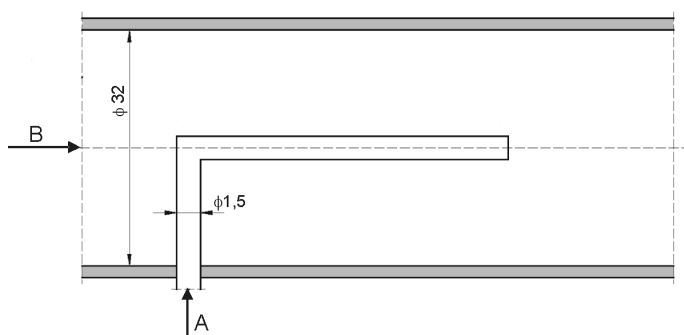
Wprowadzenie

Uzyskanie oczekiwanego produktu prowadzi się bardzo często wykorzystując szereg złożonych reakcji chemicznych, w których tylko jeden z produktów jest pożądanym, zaś reszta uboczna, często bywa szkodliwa i trudna w utylizacji. Dlatego istotne jest prowadzenie procesu w optymalnych warunkach. Na przebieg szybkich reakcji chemicznych mają wpływ, oprócz kinetyki reakcji, również odpowiedni sposób kontaktowania reagentów, intensywność mieszania oraz sposób prowadzenia procesu. Można więc wpływać na rodzaj i jakość wytwarzanych produktów zarówno poprzez zmianę parametrów chemicznych (stężenie, temperatura, pH itp.), ale również za pomocą parametrów fizycznych (np. szybkość dozowania, rodzaj reaktora, typ operacji itd.). Odpowiednie zastosowanie wymienionych parametrów pozwala często nie tylko na uzyskanie lepszej wydajności oczekiwanego produktu, ale również mniejszej ilości produktów ubocznych (w tym uciążliwych dla środowiska), a często również zmniejszenie liczby niezbędnych etapów produkcyjnych. W niniejszej pracy, na przykładzie testowej reakcji precypitacji siarczanu baru, przedstawiono wpływ wybranych parametrów fizycznych na cechy produktu końcowego, w szczególności – na średni rozmiar cząstek.

Metodyka badań

W pracy rozważamy dwa typowe reaktory przepływowe: reaktor rurowy z dozowaniem osiowym oraz reaktor kanałowy z dozowaniem poprzecznym. Średnica wewnętrzna pierwszego z wymienionych reaktorów wynosiła 32 mm, średnica zewnętrzna dozownika – 1,5 mm, średnica wewnętrzna dozownika – 1,1 mm, długość reaktora liczona od wylotu dozownika – 1800 mm. Schemat głowicy reaktora rurowego przedstawiono na rys. 1.

W przypadku reaktora przepływowego z dozowaniem poprzecznym wybrano kanałowy reaktor o przekroju kwadratowym, z zainstalowanym wewnątrz progim, w którym



Rys. 1. Schemat reaktora rurowego zasilanego strumieniami A i B

umieszczono dozownik. Wymiary kanału w przekroju poprzecznym wynosiły 46×46 mm, zaś prostokątny próg o wymiarach 20×46×15 mm umieszczony był na dnie kanału. W centrum górnej ściany progu umieszczony był wylot z dozownika o średnicy 1 mm. Więcej informacji na temat geometrii tego układu oraz wyniki obliczeniowe przedstawiono w artykule Makowskiego i Orciucha [1].

W celu wyznaczenia pola prędkości i stężenia niereagującego traseru wykorzystano pakiet obliczeniowej mechaniki płynów *Fluent 6.3*. W obliczeniach wykorzystano standardowy model burzliwości *k-ε*, zaś współczynnik dyfuzji burzliwej niereagującego traseru D_T wyznaczono z następującego równania:

$$D_T = 0,1 \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (1)$$

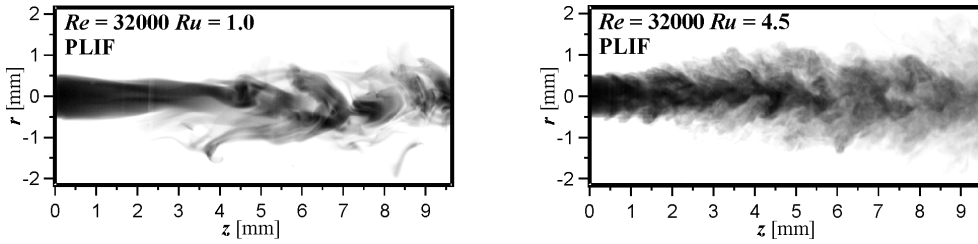
Obliczenia dla reaktora rurowego przeprowadzono dla liczb *Reynoldsa* równych $Re = 32\,000$ i $Re = 41\,600$, oraz dla $Ru = 1 \div 4,5$, gdzie Ru jest wielkością zdefiniowaną jako stosunek średniej prędkości płynu podawanego z dozownika do średniej prędkości płynu w reaktorze.

W badaniach doświadczalnych weryfikujących rezultaty obliczeń numerycznych skorzystano z laserowej techniki pomiarowej PLIF (*Planar Laser Induced Fluorescence*). Układ pomiarowy składał się z dwupulsacyjnego lasera typu Nd-YAG o długości fali równej 532 nm i maksymalnej energii równej 50 mJ na puls. Skolimowana, płaska wiązka laserowa (o grubości $\delta = 300 \mu\text{m}$) przecinała badany układ w płaszczyźnie wyznaczonej przez oś kanału i umiejscowiona była w pobliżu wylotu z dozownika. Jako fluorescencyjny traser użyto roztwór rodaminu B o stężeniu wlotowym równym $150 \mu\text{g}/\text{dm}^3$ podawany rurką dozującą (strumień A). Głównym strumieniem podawano wodę (strumień B). Przestrzenna rozdzielczość w pomiarach PLIF wynikała z rozdzielczości cyfrowego zdjęcia i grubości płaszczyzny laserowej, w omawianych pomiarach wartość ta wynosiła $7 \times 7 \times 300 \mu\text{m}$.

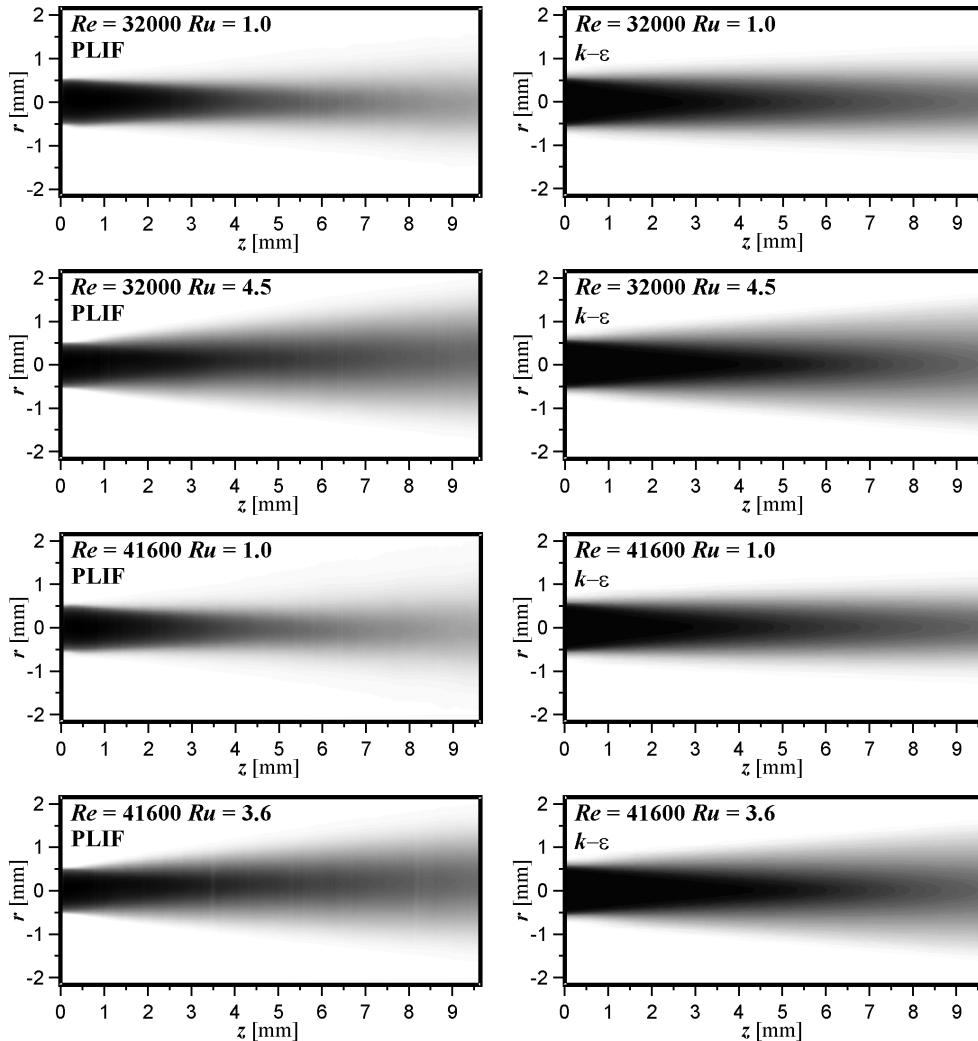
Wyniki i dyskusja

Na rys. 2 przedstawiono przykładowe rozkłady chwilowe bezwymiarowego stężenia traseru f w osiowym przekroju reaktora, bezpośrednio za rurką dozującą. Wyraźnie widać nieregularny kształt świadczący o przestrzennych i czasowych zmianach stężenia w układzie. Dla niższych wartości parametru Ru zaobserwowano wolniejsze mieszanie traseru z widocznym zagarnianiem dużych porcji płynu przez strumień główny.

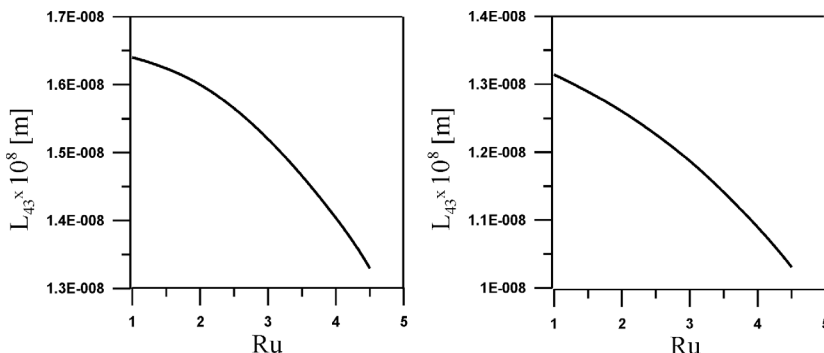
Na rys. 3 przedstawiono dla przykładu porównanie doświadczalnych i obliczeniowych fragmentów uśrednionego pola stężenia traseru bezpośrednio za dozownikiem dla



Rys. 2. Przykłady zmierzonych chwilowych rozkładów stężenia bezwymiarowego traseru f dla liczby Reynoldsa $Re = 31000$ i dwóch wartości liczby Ru (kolor czarny dla $f = 1$, kolor biały dla $f = 0$)



Rys. 3. Rozkłady średniego stężenia bezwymiarowego traseru (f) dla dwóch liczb Reynoldsa i dwóch wartości liczby Ru ; porównanie wyników pomiarów PLIF z przewidywaniami modelu $k-\epsilon$ (kolor czarny dla $f = 1$, kolor biały dla $f = 0$)



Rys. 4. Wpływ liczby Ru na średni rozmiar kryształów L_{43} , a) $Re = 32\ 000$ b) $Re = 41\ 600$

zmiennych wartości liczb Re i Ru . Uzyskano dość dobrą zgodność wartości przewidywanych z doświadczalnymi. Potwierdza to prawidłowo przeprowadzone obliczenia i umożliwia modelowanie procesu precypitacji w rozważanym układzie.

W pracy rozważamy teoretycznie proces precypitacji jonowej typu $A^+ + B^- \rightarrow P\downarrow$. Jako reakcję testową wybrano precypitację siarczanu baru z wodnych roztworów siarczanu sodu i chlorku baru. Roztwór $BaCl_2$ o stężeniu 1,5 M wstrzykiwano poprzez dozownik (strumień A) do reaktora, w którym przepływał roztwór Na_2SO_4 (strumień B) o wlotowym stężeniu 0,015 M. Proces precypitacji modelowano wykorzystując metodę momentów i kinetykę procesu, które zostały opisane w pracy *Bałdygi i Orciucha* [2]. Na rys. 4 przedstawiono przewidywany wpływ mieszania na średni rozmiar cząstek siarczanu baru obserwowanych na wylocie z reaktora. Porównując otrzymane wyniki z rezultatami dla reaktora kanałowego z dozowaniem poprzecznym w obu przypadkach obserwujemy spadek rozmiaru kryształów wraz ze wzrostem liczby Re , zaś wpływ liczby Ru nie jest już jednakowy. W przypadku reaktora rurowego następuje spadek wartości L_{43} wraz ze wzrostem liczby Ru , natomiast w przypadku reaktora kanałowego otrzymujemy charakterystyczne minimum, a następnie dla wyższych wartości Ru następuje wzrost wartości rozmiaru L_{43} .

Podsumowując, w pracy przy wykorzystaniu prostej reakcji testowej zaprezentowano wpływ szybkości dozowania oraz typu reaktora na końcowy produkt. Pokazano, że poprzez odpowiedni dobór warunków prowadzenia procesu można kontrolować własności produktów reakcji.

Praca naukowa finansowana ze środków na naukę w latach 2007-2010 jako projekt badawczy (Grant nr N N208 0303 33).

LITERATURA

1. E. Makowski., W. Orciuch: Inż. Ap. Chem. 48, nr 6, (2009).
2. J. Bałdyga, W. Orciuch: Chem. Engng Sci. 56, 2435 (2001).