

ŁUKASZ GRALLA
ZDZISŁAW JAWORSKI
BARBARA ZAKRZEWSKA
MAŁGORZATA KLEJNY

Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny, Szczecin

Modelowanie numeryczne przepływu w reaktorze rurowym z krzyżowym wlotem składników dla układu ciecz – gaz

Wprowadzenie

Przepływy dwufazowe są bardzo często spotykane w przemyśle chemicznym i pokrewnych. Ich dokładna analiza z zastosowaniem numerycznej dynamiki płynów (CFD) pozwala na rozwiązanie problemów związanych z niekontrolowanymi zmianami wewnątrz aparatu. Zagadnieniom tym poświęcono już dużo uwagi w publikacjach [1, 2]. Niniejsza praca jest wynikiem początkowych badań numerycznych związanych z przepływem dwóch substancji w różnych fazach przez reaktor z krzyżowym wlotem czynników. Jeden z nich dostarczany jest jako faza gazowa, a drugi w fazie ciekłej. Wykonano modelowanie dla przepływu zimnego, bez reakcji chemicznej, w celu sprawdzenia poprawności modelowania przenoszenia pędu wewnątrz aparatu. Poprawne przewidywanie hydrodynamiki w reaktorze jest warunkiem koniecznym dalszego modelowania reakcji chemicznej.

Model reaktora

Symulacje przepływów przeprowadzane były z użyciem geometrii reaktora tworzonej w oparciu o komercyjny program *Gambit 2.4*. Na rys. 1 widoczne są dwa wloty: prostopadłym kierowany jest czynnik w fazie ciekłej stanowiący fazę rozproszoną, natomiast drugim czynnikiem w fazie gazowej stanowiący fazę ciągłą.

Na zdefiniowaną geometrię naniesiono niestrukturalne tetrahedralne siatki numeryczne złożone z: 0,5 mln (Rys. 1) oraz 3,3 mln komórek obliczeniowych. W programie *Gambit* wprowadzono również warunki graniczne: dwa wloty, ściany oraz wylot.

Model matematyczny

Zazwyczaj przepływy dwufazowe opisywane są jako wspólny przepływ dwóch faz. Wyróżnia się fazę ciągłą (gaz lub ciecz) oraz rozproszoną złożoną z gazu, cieczy lub ciała stałego. Występują również przyprływy dwufazowe, w których

występują dwie fazy ciągłe. Charakteryzują się tym, że granica rozdziału zmienia się w czasie ruchu oraz występują zmienne w czasie i przestrzeni naprężenia wewnętrzne.

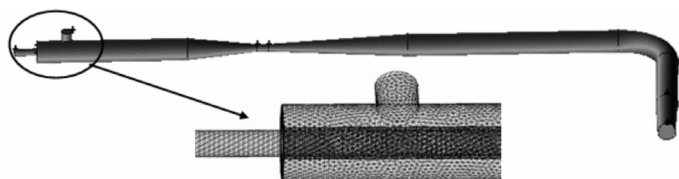
Do modeli przepływów wielofazowych zalicza się: 1) model objętości płynu stosowany w przypadku dużych objętości faz półciągłych, według którego uwzględnia się jako ułamki udział wszystkich występujących w danej komórce obliczeniowej faz, 2) model płynu półciągłego (*Eulera*) stosowany w przypadku dużego rozproszenia jednej z faz, w którym uśredniona jest ilość fazy rozproszonej w komórce obliczeniowej mamy wtedy układ pseudohomogeniczny oraz 3) model śledzenia trajektorii (*Eulera-Lagrange'a*), w którym śledzony jest ruch pojedynczego elementu fazy [3]. W prezentowanej pracy zastosowano model *Eulera*, który traktuje wszystkie fazy jako ciągłe, tym sposobem równania przepływu mają postać podobną do wyrażen dla przepływu jednofazowego z uwzględnieniem udziału objętościowego dla danej fazy [4, 5]. Podczas obliczeń rozwiązywane było równie ciągłości (1) wraz z równaniami momentu pędu w fazie ciekłej (2) oraz w fazie gazowej (3). Ponieważ przepływ był burzliwy w celu domknięcia układu równań zastosowano standardowy model burzliwości *k-ε* wraz z funkcjami przyściennymi.

$$\frac{\partial}{\partial t}(x_k \cdot \rho_k) + \nabla \cdot (\rho_k x_k \bar{u}_k) = 0 \quad (1)$$

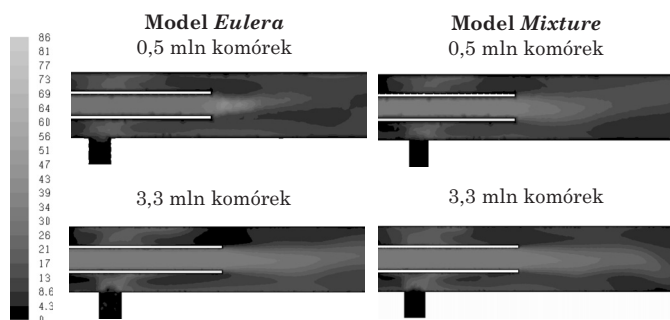
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_l x_l \bar{u}_l) + \nabla \cdot (\rho_l x_l \bar{u}_l \bar{u}_l) = -x_l \nabla P + \\ + \nabla \cdot \left(x_l u_{eff,l} \left(\nabla \bar{u}_l + (\nabla \bar{u}_l)^T \right) \right) + \rho_l \cdot x_l g + M_{l,t} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_g x_g \bar{u}_g) + \nabla \cdot (\rho_g x_g \bar{u}_g \bar{u}_g) = -x_g \nabla P + \\ + \nabla \cdot \left(x_g u_{eff,g} \left(\nabla \bar{u}_g + (\nabla \bar{u}_g)^T \right) \right) + \rho_g \cdot x_g g - M_{l,g} \end{aligned} \quad (3)$$

Dla porównania wyników modelowania zastosowano model mieszaniny wielofazowej (*Mixture*), który w odróżnieniu od modelu *Eulera* uwzględnia w równaniach wartości parametrów takich, jak gęstość czy prędkość uśrednione dla występujących w układzie faz. Traktowane są one jako kontinua, co umożliwia przekazywanie pędu, masy czy energii między składnikami [3].



Rys. 1. Reaktor rurowy z krzyżowym wlotem czynników i niestrukturalną siatką numeryczną z 0,5 mln komórek obliczeniowych



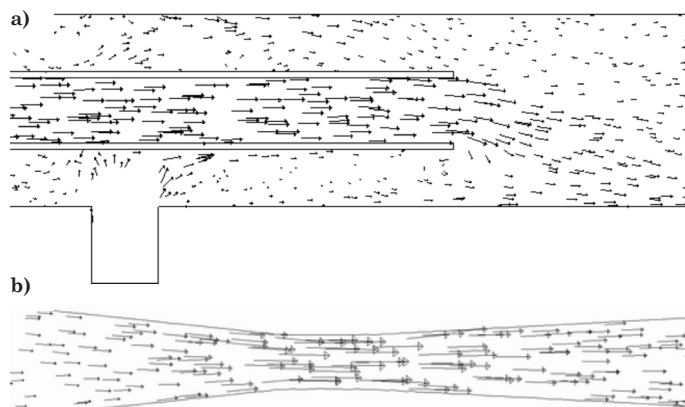
Rys. 2. Porównanie prędkości przepływów dla symulacji wykonanych przy użyciu modeli *Euler a* i *Mixture* dla przepływu gazu i dwóch gęstości siatek

Wyniki symulacji

Symulacje numeryczne burzliwego przepływu dwufazowego w reaktorze rurowym przy użyciu modeli *Euler a* oraz *Mixture* wykonano w komercyjnym programie *Fluent 6.3.26* firmy *ANSYS Inc.* Pierwszym krokiem było zdefiniowanie własności czynników wlotowych (cieczy i gazu). Następnie wybrano model obliczeniowy *Euler a* lub *Mixture* oraz określono rodzaj faz czynników przepływających przez aparat i określono warunki graniczne. Obliczenia numeryczne prowadzono dla przepływu burzliwego stosując standardowy model burzliwości $k-\epsilon$ wraz z funkcjami przyściennymi. Symulacje dla wymienionych modeli prowadzono do momentu uzyskania wartości znormalizowanych sum reszt numerycznych wynoszących około 10^{-8} . W wyniku przeprowadzonych obliczeń numerycznych otrzymano rozkład prędkości wzdłuż aparatu. Na rys. 2 przedstawiono kontury prędkości uzyskane w wyniku obliczeń z zastosowaniem modelu *Euler a* oraz *Mixture*, na przykładzie fazy gazowej i dwóch gęstości obliczeniowych. Nie przedstawiono konturów prędkości dla zwężonej części reaktora, ponieważ były one bardzo zbliżone w przypadku obu modeli dwufazowych. Porównując model *Euler a* i *Mixture* dla 0,5 mln komórek obliczeniowych można powiedzieć, że wyższe prędkości w tym samym przekroju odsuniętym o pewną odległość od wlotu czynników ma model *Mixture*. Porównując ten sam model dla różnych gęstości siatek wyższymi prędkościami przepływu charakteryzują się modele o większym zagęszczeniu komórek obliczeniowych. Na rys. 3 zamieszczono rozkłady wektorów prędkości fazy gazowej w odcinku wlotowym do reaktora (Rys. 3a) oraz w zwężeniu reaktora rurowego (Rys. 3b), które obrazują kierunek przepływu.

Podsumowanie i wnioski

Przedstawione wyniki symulacji są podstawą porównania modelowania przepływu dwufazowego ciecz-gaz przez aparat



Rys. 3. Wektory prędkości przepływu fazy ciągłej model *Euler a* siatki 0,5 mln komórek, a) odcinek wlotowy; b) przewężenie

z krzyżowym wlotem składników z wykorzystaniem modeli: *Euler a* i *Mixture*. Wyniki niniejszych obliczeń pozwalają na stwierdzenie, że na tym etapie modelowania oba modele nadają się do prowadzenia dalszych symulacji z użyciem CFD. Na rys. 3 widoczne są wektory przepływu, które wskazują na przepływ w dobrym kierunku. Tak przygotowana geometria pozwala na dalsze badania związane z wymianą masy i energii wzdłuż aparatu.

Oznaczenia

- M_i – siły międzyfazowe,
- ρ – gęstość danej fazy, [kg/m³],
- u – wektor prędkości danej fazy, [m/s],
- P – ciśnienie, [N/m²],
- x_k – udział objętościowy fazy,
- μ_{eff} – lepkość efektywna danej fazy k , [kg/ms²]

Indeks dolny

- k – dowolna faza (l – ciecz, g – gaz)

LITERATURA

1. R. Krishna, J.M. von Baten, J. Ellenberger: *Powder Technology* **100**, 137 (1998).
2. P. Spicka, M. M. Dias, J.C.B. Lopes: *Chem. Eng. Sc.* **56**, 6367 (2001).
3. Z. Jaworski: *Numeryczna mechanika płynów w inżynierii chemicznej i procesowej*, Warszawa, AOW EXIT, 2005.
4. R. Panneerselvam, S. Savithri, G.D. Surender: *Chem. Eng. Sc.* **64**, 1119 (2009).
5. Sokolichin G. Eigenberger: *Chem. Eng. Sc.* **52**, nr 4, 611 (1997).

Praca naukowa finansowana ze środków na naukę w latach 2007–2010 jako projekt badawczy, rozwojowy.