

Wojciech SAWIŃSKI, Joanna FEDER-KUBIS, Wojciech LUDWIG

e-mail: wojciech.sawinski@pwr.wroc.pl

Zakład Inżynierii Chemicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wrocław

Modelowanie CFD wypływu kropli z dystrybutora

Wstęp

Znajomość powierzchni wymiany masy jest jednym z kluczowych zagadnień związanych z ekstrakcją ciecz-ciecz. W aparacie kolumnowym podczas przepływu kropli ustala się równowaga pomiędzy koalescencją a redispersją płynących obok siebie elementów fazy rozdrobionej. Projektując kolumnę ekstrakcyjną należy dobrać odpowiedni dystrybutor dla docelowego układu ciecz-ciecz.

Wielkość i kształt powstającej w dystrybutorze kropli są uzależnione od geometrii otworów dystrybutora i materiału, z jakiego został wykonany, właściwości fizycznych układu i prędkości wypływu fazy zdyspergowanej. Należy zauważyć, że o ile właściwości fizyczne fazy wpływającej z dystrybutora uzależnione są od temperatury, to na wartość napięcia międzyfazowego pomiędzy powstającą kroplą a fazą ciągłą znaczący wpływ ma skład chemiczny fazy ciągłej.

Celem pracy było opracowanie modelu matematycznego opisującego powstawanie kropli w otworze wylotowym dystrybutora, a następnie jego weryfikacja na podstawie dostępnych w literaturze korelacji. Obliczenia wykonano dla układu woda-toluen, który ze względu na rekomendacje UPAC jest dobrze poznany

Symulacja CFD

Model matematyczny

Model matematyczny opisujący powstawanie kropli przy wypływie cieczy z pojedynczego otworu opiera się na uniwersalnych równaniach zachowania pędu i masy:

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \nabla v \right) - \nabla [\eta (\nabla v + \nabla v^T)] + \nabla p = \sigma \kappa n \delta + \rho g \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2)$$

gdzie:

δ – funkcja skoncentrowania na granicy płynów

$\sigma \kappa n \delta$ – siły napięcia powierzchniowego

W omawianym przypadku konieczne jeszcze jest jeszcze wprowadzenie równania śledzącego położenie powierzchni międzyfazowej. W tym celu zastosowano pseudohomogeniczny model *Level Set*. Nadaje się on doskonale do opisywania zjawisk z poruszającą się granicą międzyfazową, w których geometria zmienia topologię z czasem. Wykorzystuje on śledzenie izolacji będącej funkcją ω ($\omega = 0,5$ determinuje położenie granicy faz):

$$\frac{\delta \omega}{\delta t} + v \nabla \omega = \gamma \nabla \cdot \left(-\omega (1 - \omega) \frac{\nabla \omega}{|\nabla \omega|} + \varepsilon \nabla \omega \right) \quad (3)$$

przy czym parametrami inicjalizującymi są współczynniki γ i ε , a ω zmienia się od zera do jedności. Gęstość oraz lepkość mieszaniny w całym obiekcie określana jest na podstawie udziału objętościowego każdej z faz w komórce obliczeniowej:

$$\rho = \rho_c + (\rho_c - \rho_d) \omega \quad (4)$$

$$\eta = \eta_c + (\eta_c - \eta_d) \omega \quad (5)$$

Korzysta się również z udziału objętościowego ω do obliczenia funkcji wygładzającej δ ,

$$\delta = 6 |\omega (1 - \omega)| |\nabla \omega| \quad (6)$$

oraz do obliczenia normalnej granicy międzyfazowej z wyrażenia:

$$n = \frac{\nabla \omega}{|\nabla \omega|} \Big|_{\omega=0,5} \quad (7)$$

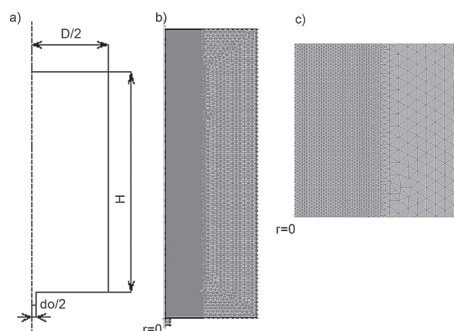
Metoda numeryczna

Rozwiązanie przedstawionego powyżej modelu w sposób analityczny jest niemożliwe. Konieczny stał się więc wybór odpowiedniego narzę-

dzia umożliwiającego otrzymanie wyników metodami numerycznymi. W związku z tym posłużono się pakietem *Comsol Multiphysics 4.1*.

Wybór układu. Symulacje CFD przeprowadzono dla układu w kształcie walca o następujących wymiarach: średnica $D = 0,05$ m i wysokość $H = 0,2$ m, które pozwoliły na wyeliminowanie ewentualnego wpływu ścian na tworzenie i poruszanie się kropli. Zastosowanie modelu osiowosymetrycznego umożliwiło skrócenie czasu potrzebnego na przeprowadzenie obliczeń. Otwór wlotowy umiejscowiony był w dolnej części walca (Rys. 1a). Słaba zwilżalność jego ścian przez fazę rozproszoną ($\alpha = 3\pi/5$) zapobiegała pełzaniu kropli, a tym samym możliwy był dokładniejszy pomiar jej średnicy.

Wygenerowana siatka zawierała 7 550 komórek i została zagęszczona w taki sposób, że dalsze zwiększanie ich liczby nie wpływało w sposób istotny na dokładność uzyskiwanych wartości mierzonych parametrów (Rys. 1b, 1c). W chwili $t = 0$ faza zwarta wypełniła główną przestrzeń obliczeniową, a faza zdyspergowana otwór wlotowy zapewniając tym samym ciśnienie $p = p_{\text{atm}} + p_{\text{hydrostat}}$ i umożliwiając jednoznaczne rozwiązanie układu równań różniczkowych.



Rys. 1. a) modelowany układ, b) siatka numeryczna, c) wycinek siatki numerycznej w miejscu jej zagęszczenia

Właściwości fizyczne układu zostały podane w postaci funkcji temperatury $f(T)$ pozwalając na otrzymanie wartości średnic powstających kropli dla zadanej temperatury.

Serie obliczeniowe. Obliczenia wykonano dla trzech zmiennych:

- prędkości wypływu v zmieniającej się od 0,01 do 0,11 m/s ze skokiem 0,01 m/s;
- temperatury T w zakresie 278–338 K ze skokiem 5 K;
- średnicy otworu wpływowego w granicach 0,0005–0,005 m ze skokiem 0,0005 m.

Dla każdej zmiennej przeprowadzono po 6 serii obliczeniowych.

Pomiar średnicy powstającej kropli odbywał się bezpośrednio w chwili oderwania się jej od otworu, co zapobiegało deformacjom kształtu powstających w wyniku oporu stawianego przez fazę zwartą. Błąd pomiaru minimalizowany był dodatkowo poprzez pomiar w dwóch płaszczyznach, równoległej do osi y oraz wzdłuż osi symetrii. Na podstawie otrzymanych wielkości obliczano objętość fazy rozdrobionej (kropli) z równania:

$$V_d = \frac{1}{6} \pi d_r^2 d_z \quad (8)$$

uwzględniając fakt zastosowania modelu osiowosymetrycznego faza zdyspergowana była kształtu elipsoidalnego i należało obliczyć średnicę zastępczą dla kuli o identycznej objętości:

$$d_z = \sqrt[3]{\frac{6V_d}{\pi}} = \sqrt[3]{\frac{6 \left(\frac{1}{6} \pi d_r^2 d_h \right)}{\pi}} = \sqrt[3]{d_r^2 d_h} \quad (9)$$

Odpowiednie średnice kropli uzyskiwane były poprzez eksportowanie otrzymanych wyników, w chwili oderwania się fazy rozdrobionej od otworu, w celu utworzenia wykresów $\omega = f(z)$, $\omega = f(r)$, z których można było wyznaczyć współrzędne granicy międzyfazowej ($\omega = 0,5$).

Wyniki i dyskusja

Powstawanie kropli wg obliczeń CFD pokazano na rys. 2. Na podstawie obliczeń przedstawionych poniżej można zauważyć, że kropla tworzy się według mechanizmu dwustopniowego. Najpierw tworzy się kropla, która po osiągnięciu pewnej objętości odsuwa się od otworu tworząc szyjkę, poprzez którą dopływająca z dystrybutora ciecz powoduje wzrost kropli, aż do oderwania. Średnica powstających kropli zależna jest od temperatury, średnicy otworu wypływowego oraz prędkości wypływu.

Porównanie wyników symulacji

W celu dokładnego zbadania wpływu prędkości wypływu na powstającą fazę zdyspergowaną oraz realnej oceny przydatności metod modelowania numerycznego w przepływach kroplowych ciecz-ciecz wyniki otrzymane metodami CFD porównano ze średnicami kropli obliczonymi z dwóch zależności:

1. Korelacji Harkinsa-Browna, która została wyprowadzona teoretycznie na podstawie bilansu sił działających na powstającą kroplę [Horwath i in., 1978]:

$$V_d = \chi \frac{\pi \sigma d_o}{g \Delta \rho} \quad (10)$$

Nie uwzględnia ona jednak prędkości wypływu cieczy jako czynnika decydującego o średnicy fazy drobnej.

Współczynnik korygujący χ wykorzystano jako uzupełnienie rozwiązania teoretycznego. W pracy użyto dwie zależności określające χ : Horwatha i in., [1978] oraz Hanga i Mori'ego [1993]. Obie bazują na podejściu, w którym znane jest napięcie międzyfazowe w układzie.

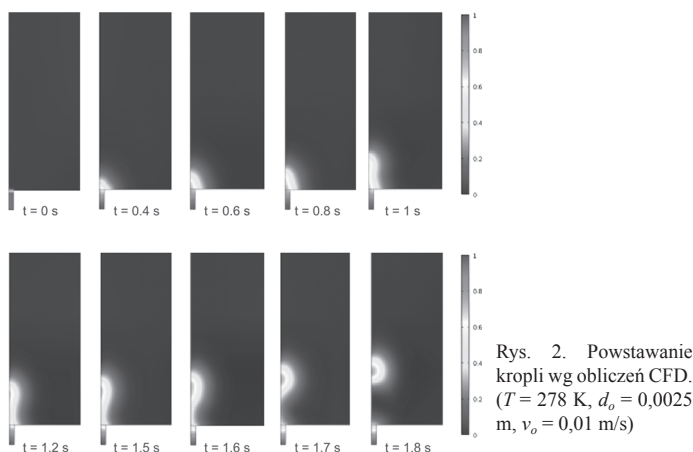
2. Korelacji Izarda. Należy zaznaczyć, że korelacja Harkinsa-Browna jest poprawna jedynie w przypadku, gdy proces powstawania kropli w dystrybutorze jest quasi-statyczny. W rzeczywistości proces taki zawsze ma charakter dynamiczny, dlatego też jako drugą użyto korelację Izarda [1972] uwzględniającą wpływ prędkość wypływu cieczy z dystrybutora na średnicę kropli:

$$V_d = \frac{1}{\Delta \rho g} (\pi d_o \sigma + C_i) \quad (11)$$

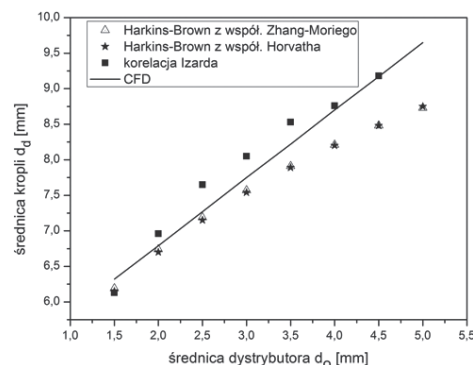
gdzie:

$$C_i = \frac{\pi d_o v_o \eta_o (\eta_c + 1,5 \eta_d)}{2 (\eta_c + \eta_d)} - \frac{\pi d_o^2 v_o^2 \rho_d}{3} \left(1 - \frac{2 \rho_d}{2 \rho_d + \rho_c} \right) \quad (12)$$

Wielkości powstającej fazy rozdrobnionej otrzymane na podstawie obliczeń numerycznych różniły od uzyskanych z korelacji literaturowych. Na rys. 3 zestawiono uzyskane wyniki obliczeń CFD z wynikami otrzymanymi z korelacji dla przykładowo wybranych parametrów ruchowych. Na podstawie wszystkich wykonanych obliczeń stwierdzono, że średnia różnica pomiędzy średnicą obliczoną z CFD a wyznaczoną z korelacji Harkinsa-Browna wynosi 7,2% (uwzględniając oba sposoby wyznaczenia współczynnika korygującego), maksymalna różnica nie przekroczyła 18%. Znacznie lepszą zbliżoność uzyskano dla zależności Izarda. Średnia różnica między wartościami średnic powstających kropli wynosiła 2,4%, a maksymalna różnica nie przekroczyła 10%.



Rys. 2. Powstawanie kropli wg obliczeń CFD. ($T = 278 \text{ K}$, $d_o = 0,0025 \text{ m}$, $v_o = 0,01 \text{ m/s}$)



Rys. 3. Porównanie uzyskanych wyników z korelacjami literaturowymi ($T = 308 \text{ K}$, $v_o = 0,01 \text{ m/s}$)

Wnioski

Wykorzystanie metod CFD do modelowania przepływów kroplowych ciecz-ciecz jest zasadne, potwierdzają to wyniki badań nad średnicami powstających kropli w układzie toluen-woda oraz wyniki uzyskane przez innych badaczy [Soleymani i in., 2007].

Optymalny dobór dystrybutora pozwala na wprowadzenie do aparatu przeciwprądowego kropli o wielkościach zbliżonych do tych wynikających z równowagi pomiędzy koalescencją a redispersją dla danego układu. Dzięki temu w pełni można kontrolować proces i efektywnie wykorzystać całą przestrzeń aparatu.

Badania przeprowadzono dla 3 parametrów, od których zależna jest wielkość powstającej fazy rozdrobnionej: średnicy dystrybutora, temperatury oraz prędkości w dystrybutorze. Uzyskane wyniki pokazują, że dla niskich prędkości fazy rozproszonej (poniżej prędkości powstawania strugi) krople formowane są w sposób dwuetapowy.

Średnice kropli obliczone metodą CFD w całym przebadanym zakresie niewiele różnią się od wartości uzyskanych z korelacji Izarda.

Na kolejnym etapie badań do modelu powinny zostać wprowadzone równania opisujące wymianę masy pomiędzy kroplą a fazą ciągłą.

Oznaczenia

- d – średnica [m]
- g – przyspieszenie ziemskie [m/s^2]
- V – objętość [m^3]
- v – prędkość [m/s]
- η – lepkość dynamiczna [$\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$]
- ρ – gęstość [kg/m^3]
- σ – napięcie powierzchniowe [N/m]
- χ – współczynnik korygujący [-]

Indeksy

- d – kropla
- o – otwór
- c – faza ciągła
- r – promień

LITERATURA

- Horvath M., Steiner L., Hartland S., 1978. Prediction of drop diameter, hold-up and backmixing coefficients in liquid/liquid spray columns. *Can. J. Chem. Eng.*, **56**, 9-18. DOI: 10.1002/cjce.5450560102
- Izard J.A., 1972. Prediction of drop volume in liquid-liquid systems. *AIChE J.*, **18**, 634-638. DOI: 10.1002/aic.690180326
- Soleymani A., Laari A., Turunen I., 2007. Numerical study on drop formation in single hole in solvent extraction [in:] Proceedings of Eur. Congress Chem. Eng. (ECCE-6) Copenhagen, 16-20 September. (12.2013): http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/prost/proceedings/ecce6_sep07/upload/864.pdf
- Zhang Z.Q., Mori Y.H., 1993. Formulation of Harkins-Brown correction factor for drop-volume description. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**, 2950-2952. DOI: 10.1021/ie00023a070

Praca była finansowana z dotacji Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego na działalność statutową Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej.