

Mgr inż. Artur Wodolański

Główny Instytut Górnictwa
Zakład Oszczędności Energii i Ochrony Powietrza
Plac Gwarków 1, 40-166 Katowice
e-mail:awodolazski@gig.katowice.pl

Modelowanie hydrodynamiki zawiesiny w reaktorze zbiornikowym z mieszadłem dwułopatkowym

Słowa kluczowe: *symulacja CFD, zawiesina cząstek, reaktor zbiornikowy z mieszadłem*

Streszczenie: W pracy zaprezentowano metodę modelowania CFD hydrodynamiki zawiesiny w zbiornikowym reaktorze z mieszadłem. Obliczenia numeryczne przeprowadzono dla mieszadła dwułopatkowego. Podjęto analizę nad uzyskaniem równomiernego rozkładu cząsteczek stałych zawiesiny w całej objętości reaktora. W artykule zaprezentowano wybrane rezultaty symulacji hydrodynamiki zawiesiny cząstek stałych katalizatora CuO/ZnO w oleju parafinowym. Badania te miały na celu określenia pól prędkości i stężenia zawiesiny w reaktorze. Obliczenia numeryczne przeprowadzono dla zawiesiny o różnej średnicy cząstek, gęstości złoża w mieszalniku bez przegród. Brak przegród miał na celu ograniczenia ścierności cząstek ciała stałego oraz zapewnienie lepszej wymianie masy pomiędzy fazą stałą a ciekłą.

Wprowadzenie

Procesy technologiczne przebiegające w reaktorze zbiornikowym z mieszaniem mechanicznym są szeroko stosowane w operacjach jednostkowych takich jak: krystalizacja, rozpuszczanie czy w prowadzeniu reakcji chemicznej w układzie trójfazowym (z zawieszonym katalizatorem). W przemyśle chemicznym są to głównie reakcje syntezy metanolu, Fischera-Tropscha, utleniania p-ksylenu do kwasu tereftalowego czy produkcji polimerów z użyciem polimeryzacji zawiesinowej [2,3,5].

Zaletą układu zawiesinowego jest możliwość uzyskania ruchu wszystkich zdyspergowanych cząstek zawiesiny w całej objętości reaktora, a także skuteczna eliminacja gradientów termicznych czy stężeniowych. Skutkuje to wysoką wydajnością prowadzonych reakcji [4].

Hydrodynamikę złoża zawiesinowego reaktora z mieszadłem można scharakteryzować poprzez pomiary eksperymentalne lub symulacje numeryczne. Obecnie jednak trudno jest zmierzyć profil stężenia zawiesiny w całej objętości reaktora, zwłaszcza w rejonach wysokiej dyssypacji energii [6]. Matematyczny opis hydrodynamiki wytwarzania układu zawiesinowego jest utrudniony ze względu na interakcje między przepływem wokół obracającego się mieszadła a stacjonarną przegrodą [8]. W innych przypadkach sytuację mogą komplikować dodatkowo reakcje zachodzące w fazie ciekłej w obecności stałego katalizatora. Wpływają na to również parametry takie jak: wielkość, rodzaj czy częstość obrotów mieszadła. Ważnym aspektem jest kontrola temperatury w złożu zawiesinowym, ponieważ pozwala utrzymać ściśle izotermiczne środowisko reakcji. W przypadku, gdy

szybkość uwalnianego ciepła przekracza ilość ciepła jaka może zostać usunięta poprzez schłodzenie reaktora, następuje znaczny spadek wydajności i selektywności reakcji [4]. Jednym z podejść do rozwiązania problemów związanych z optymalizacją układu zawieszinowego w reaktorze zbiornikowym jest obliczeniowa dynamika płynów z ang. „Computer Fluid Dynamics” (CFD). Pozwala ona na lepsze zrozumienie procesu, jego niezawodności i bezpieczeństwa [3]. Hydrodynamika układu dwufazowego w układzie cieczy-ciało stałe w reaktorze zbiornikowym wciąż nie jest dostatecznie zbadana i ilościowo opisana [1]. N.Qi i H.Zhang badali zjawiska hydrodynamiki zawiesziny dwufazowej w reaktorze z turbiną Smitha i Rushtona [6]. W dostępnej literaturze widoczny jest brak danych na temat wpływu mieszadła dwułopatkowego na hydrodynamikę zawiesziny. Celem badań było określenie pól prędkości i stężenia zawiesziny w reaktorze dla różnej średnicy cząstek oraz gęstości złoża. Przeanalizowano również wpływ ciśnienia dynamicznego na łopatki mieszadła, co odgrywa ważną rolę w analizie sprawności mieszadła oraz w prowadzeniu obliczeń konstrukcyjno-wytrzymałościowych łopatek. Wyniki mogą zostać wykorzystane w procesie syntezy metanolu do optymalizowania kosztów produkcji, w problemach dezaktywacji katalizatora, czy w obliczeniach konstrukcyjno-wytrzymałościowych łopatek mieszadła.

2. Metodyka badań i obiekt modelowania

W niniejszej pracy do opisu hydrodynamiki układu dwufazowego zastosowany został model eulerowsko-eulerowski ze standardowym modelem turbulencji k-ε. Model ten opiera się na równaniach transportu dla kinetycznej energii burzliwości (k) i szybkości jej dyssypacji (ε). Fazy: ciekła i stała traktowane są jako nawzajem przenikające kontinua, które przekazują pęd, energię bądź masę składnika.

Równanie ciągłości (1) i pędu (2) dla analizowanego układu podane jest poniżej:

$$\frac{\partial (\alpha_i p_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i) = 0 \quad (1)$$

gdzie: α_i , p_i , \vec{u}_i oznaczają ułamek objętościowy, gęstość, wektor prędkości, odpowiednio poprzez indeks i fazę stałą lub ciekłą.

$$\frac{\partial (\alpha_i p_i \vec{u}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{u}_i \vec{u}_i) = -\alpha_i \nabla p_i + \nabla \cdot (\mu_i \nabla \vec{u}_i + \mu_i \nabla \vec{u}_i^T) + \vec{F}_c + \vec{F}_i + \alpha_i \rho_i \vec{g} \quad (2)$$

gdzie: p , μ , \vec{g} oznacza ciśnienie, lepkość oraz przyspieszenie grawitacyjne, F_c - odśrodkowa siła Coriolisa (Ochieng & Onyango, 2008), a F_i to siła międzyfazowa oddziaływania fazy ciekłej na stałą.

Opór międzyfazowy składnika w fazie stałej-ciecz jest liczony z poniższego równania [3]:

$$\vec{F}_{is}^D = \frac{3}{4} \frac{C_{D, is}}{d_s} \rho_l \alpha_s |\vec{u}_s - \vec{u}_l| (\vec{u}_s - \vec{u}_l) \quad (3)$$

gdzie C_{Dis} - współczynnik oporu liczony jest z klasycznego modelu Schillera-Naumanna Siła turbulentnej dyspersji liczona jest z [3] :

$$\bar{F}_{is}^T = C_{TD} C_D \frac{v_{il}}{\sigma_{il}} \left(\frac{\nabla \alpha_s}{\alpha_s} - \frac{\nabla \alpha_l}{\alpha_l} \right) \quad (4)$$

gdzie: C_{TD} -oznacza współczynnik przenika pędu dla międzyfazowych sił oporu, v_{il} - lepkość turbulentna, σ - turbulentna liczba Schmidta, a α_i oznaczają ułamek objętościowy odpowiednio dla fazy ciekłej i stałej.

Standardowy model turbulencji k- ε opisany jest równaniem:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_l \rho_l k_l) + \nabla (\alpha_l \rho_l \bar{u}_l k_l) = \nabla \left[\alpha_l \left(u_l + \frac{\mu_{tl}}{\sigma_k} \right) \nabla k_l \right] + \alpha_l P_l - \alpha_l P_l - \alpha_l \rho_l \varepsilon_l \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_l \rho_l \varepsilon_l) + \nabla (\alpha_l \rho_l \bar{u}_l \varepsilon_l) = \nabla \left[\alpha_l \left(u_l + \frac{\mu_{tl}}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon_l \right] + \alpha_l \frac{\varepsilon_l}{k_l} C_{\varepsilon 1} P_l - C_{\varepsilon 2} \rho_l \varepsilon_l \quad (6)$$

gdzie: $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k , σ_ε są to parametry dla standardowego modelu k- ε i wynoszą odpowiednio: $C_{\varepsilon 1}=1.44$, $C_{\varepsilon 2}=1.9$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$ [3].

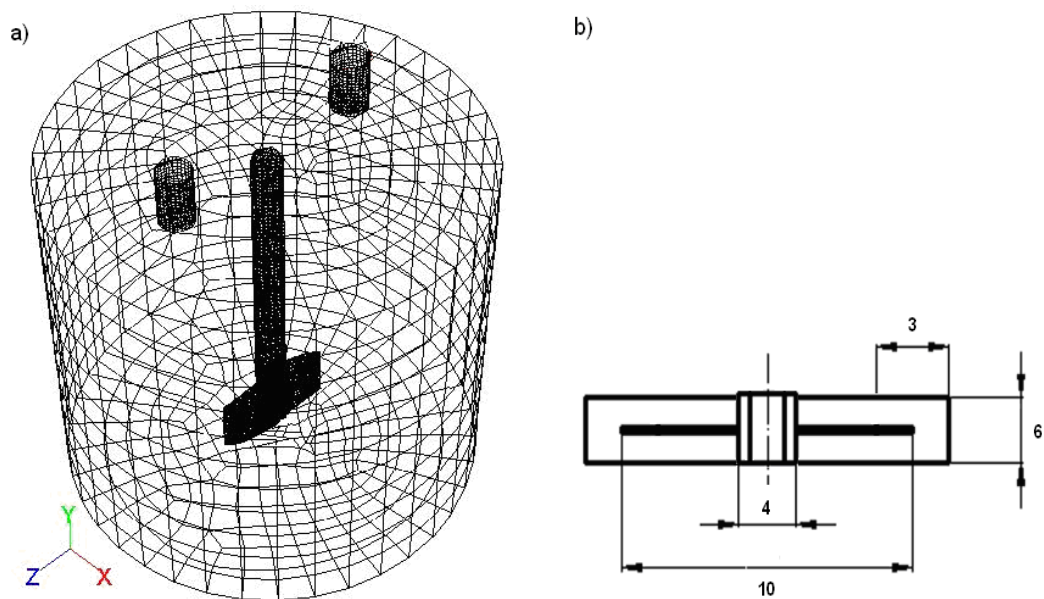
Turbulencja fazy ciekłej została obliczona bazując na modelu turbulencji Sato [7].

Turbulencja fazy stałej została zamodelowana przy użyciu równania zerowego rzędu gdzie lepkość turbulencji fazy stałej jest proporcjonalna do lepkości fazy ciekłej:

$$\mu_{ts} = \frac{\rho_s}{\rho_l} \frac{\mu_{tl}}{\sigma_t} \quad (7)$$

gdzie: σ_t jest to turbulentna liczba Prandtla wiążąca kinematyczną lepkość fazy stałej μ_{ts} do kinematycznej lepkości fazy ciekłej μ_{tl} .

Obiektem badań była geometria mieszalnika z płaskim dnem z mieszadłem dwułopatkowym własnej konstrukcji przedstawionym na rys. 1 wraz z poszczególnymi wymiarami w tabeli 1. Mieszadło to znajduje się na wysokości $h=0.14D$ od dna zbiornika. Fazę ciekłą zawiesiny stanowił olej parafinowy, a fazę stałą cząsteczki katalizatora CuO/ZnO, którego właściwości fizykochemiczne zostały przedstawione w tabeli 2. Siatki numeryczne wygenerowano przy użyciu modułu przygotowawczego MixSim 2.1.10 wraz z układem wielokrotnego odniesienia MRF (*moving reference frame*). Do wyznaczenia przepływów nieustalonych w czasie modelowania zastosowano pakiet Ansys-CFX 12.1. Symulację prowadzono do czasu $t=387$ s z krokiem czasowym $\Delta t = 0,001$ s.



Rys. 1. Model mieszalnika zbiornikowego (po lewej-bez siatki obliczeniowej), schemat mieszadła (po prawej)

W obliczeniach mieszalnik zbiornikowy podzielony został na dwie części: wewnętrzną strefę obrotową i zewnętrzną strefę nieobrotową. W celu poprawy spójności i dokładności obliczeń model został wykonany dla różnych gęstości siatek.

W badaniach przyjęto następujące uproszczenia modelowe:

- brak ograniczeń transportu masy pomiędzy fazą stałą, a ciekłą
- brak poślizgu na elementach mieszadła i ścianie zbiornika
- w warunkach początkowych występuje równomierne zdyspergowanie zawiesiny na dnie zbiornika, podczas gdy płyn pozostaje nieruchomy w pozostałej części zbiornika

Tabela 1. Wybrane wymiary reaktora oraz parametry siatki

Parametr	Wartość
Średnica mieszadła, mm	15
Wysokość łopatek, mm	6
Objętość reaktora, mm	300
Średnica reaktora, mm	49,5
Wysokość reaktora, mm	156
Parametry siatki numerycznej	
Liczba komórek obliczeniowych, tys.	259; 649; 953
Liczba komórek w obszarze mieszadła (sliding mesh), tys.	374,350
Maksymalna skośność komórek siatki	0,54

Poszczególne parametry symulacji numerycznej zostały przedstawione w tabeli 2.

Tabela 2. Główne parametry symulacji numerycznej i fizykochemiczne właściwości układu ciec-ciało stałe.

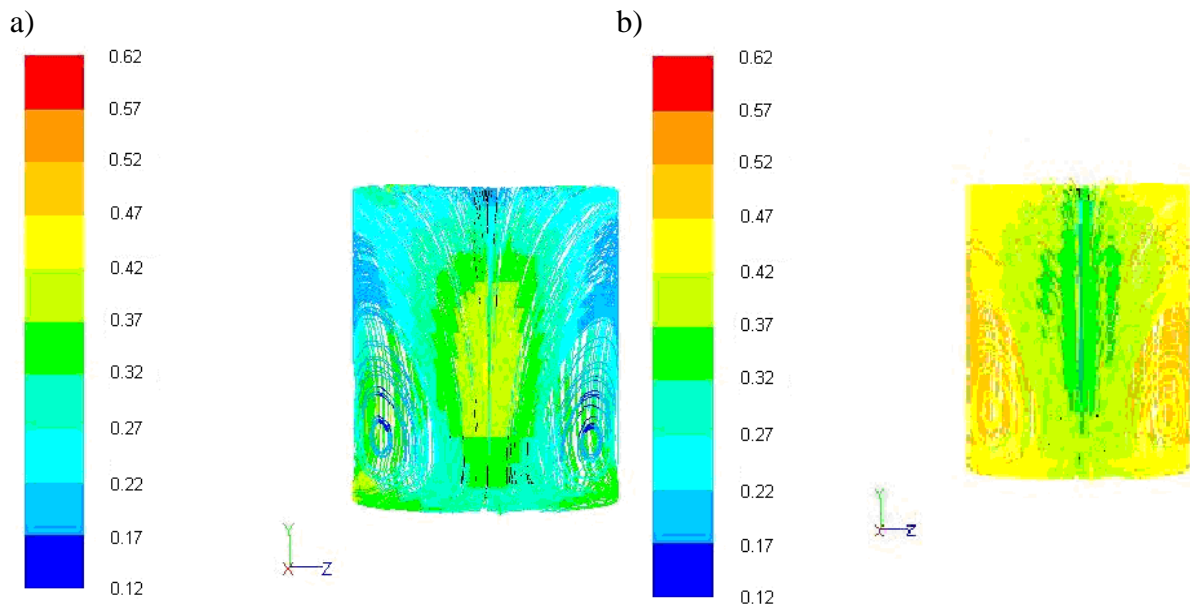
Parametr	Wartość
Prędkość obrotowa mieszadła, obr/min	350-1420
Moc mieszania, W	4,8-6,5
Gęstość złoża katalizatora, kg/m ³	2000 ; 4000
Lepkość zawiesiny, Pa·s	0,001; 0,002
Wielkość cząstek katalizatora, μm	100;300
Ilość oleju parafinowego, ml	150
Załadunek katalizatora, (mas.%)	0-15

3. Omówienie wyników

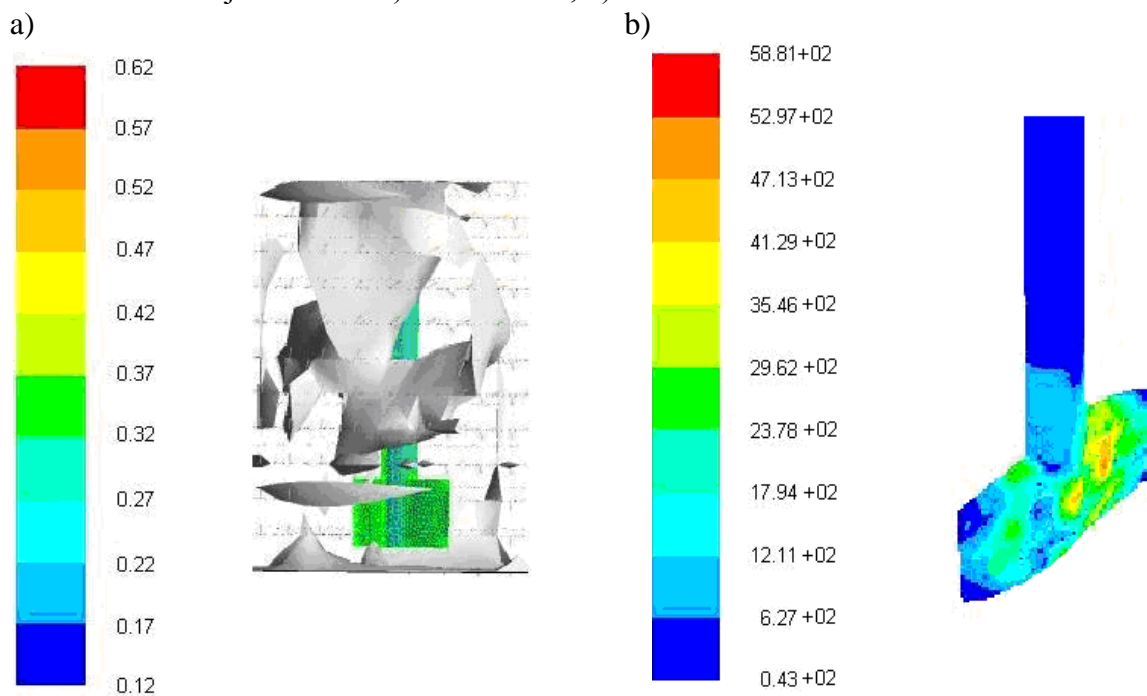
Z przeprowadzonych obliczeń uzyskano rozkład pól prędkości zawiesiny w mieszalniku dla różnych prędkości obrotowych mieszadła, przedstawionych na rys. 2. Kontury wektorowe mieszania z wizualizacją stanu zawiesiny dla 47 sekundy przedstawiono na rys. 3a. Najintensywniejsze mieszanie występuje w strefie mieszadła, przy czym zawiesina cyrkulując w kierunku powierzchni swobodnej osiągając ścianę mieszalnika spływa w kierunku dna zbiornika. Przy małych prędkościach obrotowych mieszadła zaobserwowano martwe strefy zlokalizowane w pobliżu ścian zbiornika (rys.2a). W miarę wzrostu prędkości obrotowej mieszadła (890 obr/minutę) następuje większe wyrównanie stężenia zawiesiny w całej objętości reaktora. W obszarze mieszania występują charakterystyczne struktury wirowe. Na podstawie wyników symulacji przedstawionych na rys. 2 i 4 wynika, że hydrodynamika zawiesiny w reaktorze zależy głównie od prędkości obrotowej mieszadła, właściwości fizykochemicznych zawiesiny oraz od załadunku fazy stałej w zawiesinie.

W wyniku obliczeń przeprowadzono również rozkłady ciśnienia dynamicznego oddziaływujące na łopatki mieszadła (rys. 3b). Największe ciśnienie dynamiczne wywierane jest przez zawiesinę na łopatki w ich środkowej części. Również w miejscach połączenia łopatki z tarczą występują naprężenia, które należy uwzględnić projektując połączenie.

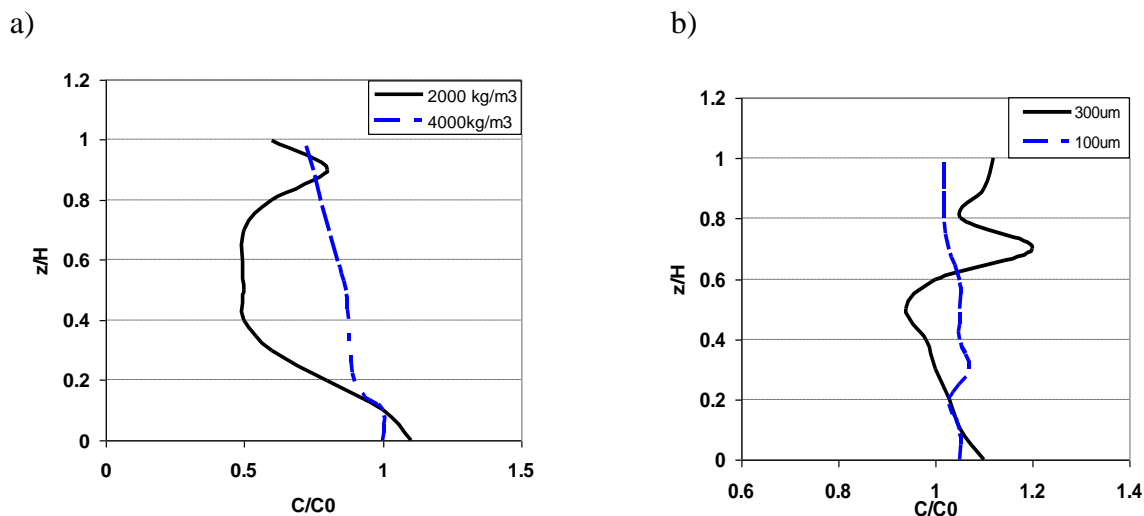
Na rys. 4 przedstawiony jest znormalizowany rozkład stężenia cząsteczek stałych katalizatora CuO/ZnO w zależności od gęstości złoża (rys. 4a) oraz rozmiaru cząstek (rys. 4b). Przy czasie około 128 sek. i obrotów mieszadła 890 obr/min zgromadzone cząstki dyspergują od dna zbiornika i są jednorodnie zawieszane. Zwiększenie załadunku fazy stałej katalizatora wymaga znacznie większej mocy mieszadła (Rys.5a). Przy małych prędkościach obrotowych zaobserwowano liczne niestabilności w układzie charakteryzujące się nierównomiernym rozproszeniem zawiesiny w całej objętości reaktora. Na rys. 5b pokazano profile rozkładu składowych osiowych prędkości zawiesiny przy różnym załadunku fazy stałej ($\alpha=2,5;10\%$ obj. dla $\mu=1\cdot 10^{-3}\text{Pa}\cdot\text{s}$, $d_s = 100 \mu\text{m}$). Dla początkowego obciążenia 2,5% fazy stałej pojawia się charakterystyczny pik osiowej prędkości na końcu wirnika(u_0) gdzie maksymalna prędkość spada z $0.4u_0$ do $0.2u_0$. Dla objętościowego załadunku fazy stałej 10% występuje znacznie większy spadek z wartości $0.57u_0$ do $0.2u_0$, ale utrzymywany przez znacznie dłuższy czas.



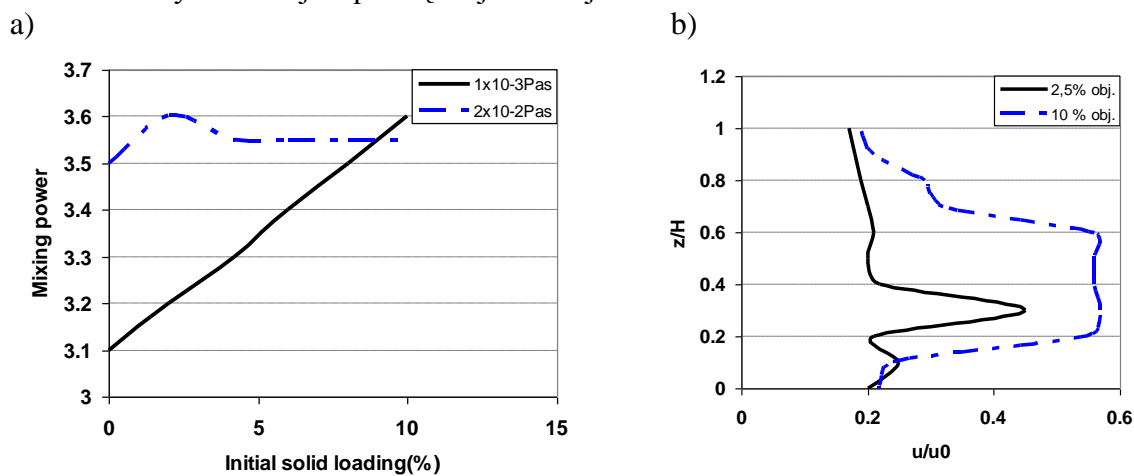
Rys. 2. Kontury prędkości zawiesiny w płaszczyźnie osiowej dla wybranej prędkości obrotowej mieszadła a) 429 obr/min, b) 890 obr/min



Rys.3. Wektory prędkości zawiesiny w płaszczyźnie osiowej dla prędkości obrotowej mieszadła 770 obr/min (3a), rozkład ciśnienia dynamicznego zawiesiny oddziaływujący na łopatkę mieszadła, Pa (3b).



Rys. 4. Znormalizowane rozkład stężenia zawiesiny przy jej różnych gęstościach ($\rho=2000,4000$) oraz rozmiarach cząstek katalizatora ($d_s =100 \mu\text{m}, 300 \mu\text{m}$) dla bezwymiarowej współrzędnej osiowej z/H .



Rys. 5. Moc mieszania dla różnych lepkości zawiesiny ($\mu=1\cdot 10^{-3}, 2\cdot 10^{-3}$) przy różnym załadunku fazy stałej (0-10%) dla $d_s=100 \mu\text{m}, \rho=2000 \text{ kg/m}^3$ (5a). Osiowy rozkład prędkości cieczy przy wybranych obciążeniach załadunku cząstek fazy stałej ($\alpha=2,5;10\% \text{ obj.}$ dla $\mu=1\cdot 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}, d_s=100 \mu\text{m}$),(5b).

4. Podsumowanie i wnioski

W artykule przeprowadzono badania modelowe hydrodynamiki zawiesiny w reaktorze z mieszadłem dwułopatkowym. W symulacjach użyto 2-fazowego modelu eulerowsko-eulerowskiego ze standardowym modelem turbulencji $k-\varepsilon$. W wyniku badań stwierdzono następujące wnioski:

-jednostkowa moc mieszania może zostać przewidziana dla zawiesiny: ciecz-ciało stałe poprzez wprowadzenie średniej gęstości zawiesiny. Wraz ze wzrostem załadunku fazy stałej w zawieszynie wymagana jest większa moc jednostkowa mieszadła, a dla zwiększonej lepkości $2 \cdot 10^{-3}$ Pa·s dla zakresu obciążeń załadunku fazy stałej (0-10%) utrzymuje się na stałym poziomie-rys. 5a)

-wraz ze zwiększeniem gęstości zawiesiny oraz rozmiarów cząstek fazy stałej zwiększa się ich prędkość opadania, a także zmniejsza się jednorodność dystrybucji cząstek stałych w zawieszynie

-wyższy początkowy załadunek cząstek fazy stałej w zawieszynie odpowiada niejednorodnej dystrybucji cząstek stałych w całej objętości zawiesiny. Jednorodność zawiesiny może również zostać osiągnięta poprzez zwiększenie lepkości rozpuszczalnika

-ciśnienia dynamiczne wywierane przez zawieszinę najbardziej oddziałuje na przednią stronę łopatek

-wraz ze wzrostem gęstości siatki numerycznej występuje znaczne wydłużenie czasu symulacji, ale pozwala to na znaczne precyzyjniejsze wyznaczenie stref o mniejszej intensywności mieszania

Literatura

1. Deglon, D. A., Meyer, C. J.: CFD modeling of stirred tanks: Numerical considerations. *Minerals Engineering*, 2006; 19(10): 1059–1068.
2. Hosseini, S., Patel, D., Ein-Mozaffari, F., Mehrvar, M.: Study of solid–liquid mixing in agitated tanks through computational fluid dynamics modeling. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2010; 49(9): 4426–4435.
3. Kasat, G. R., Khopkar, A. R., Ranade, V. V., Pandit, A. B.: CFD simulation of liquid-phase mixing in solid–liquid stirred reactor. *Chemical Engineering Science* 2008; 63(15): 3877–3885.
4. Montante, G., Magelli, F. Modelling of solids distribution in stirred tanks: Analysis of simulation strategies and comparison with experimental data. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 2005; 19(3): 253–262.
5. Murthy, B. N., Ghadge, R. S., Joshi, J. B.: CFD simulations of gas–liquid–solid stirred reactor. Prediction of critical impeller speed for solid suspension. *Chemical Engineering Science* 2007; 62(24): 7184–7195.
6. Qi, N. N., Wu, G. Y., Wang, H., Zhang, K., Zhang, H.: CFD simulation of mixing characteristics in stirred tank by Smith turbine. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* 2010; 61(9): 2305–2313.
7. Sato, Y., Sadatomi, M., Sekoguchi, K. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow-I. *International Journal of Multiple Flow*, 1981; 7(2): 167–177.
8. Yamazaki, H., Tojo, K., Miyanami, K.: Concentration profiles of solids suspended in a stirred tank. *Powder Technology* 1986; 48(3): 205–216.

