

MAŁGORZATA KLEJNY
ZDZISŁAW JAWORSKI
BARBARA ZAKRZEWSKA
ŁUKASZ GRALLA

Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny, Szczecin

Modelowanie numeryczne układu gaz – ciecz w reaktorze półkowym o przepływie przeciwbieżnym

Wprowadzenie

Modelowanie za pomocą kodów numerycznej dynamiki płynów (CFD) jest często stosowane do symulacji przepływów wielofazowych. W niniejszej pracy zajęto się procesem, w którym mamy do czynienia z układem gaz-ciecz. Głównym aparatem technologicznym omawianego procesu jest przeciwbieżny reaktor półkowy z elementami chłodniczymi. Do reaktora od góry dopływa strumień ciekły, natomiast od dołu – gazowy.

Do symulacji komputerowej przepływów wielofazowych w programie *Fluent* można stosować jeden z czterech modeli takich jak: *VOF (Volume of Fluid)*, *Mixture*, *Eulera* lub *Weat Steam*. Każdy z nich ma swoje specyficzne właściwości. Wybór modelu zależy między innymi od rodzaju przepływu oraz dokładności obliczeń. Przykładowo model *VOF* stosuje się, gdy mamy do czynienia z dużymi pęcherzami w ciągłym strumieniu płynu, natomiast *Mixture* i *Eulera*, gdy występuje rozproszenie jednej fazy w drugiej. W przypadku aparatów z wielofazowym przepływem przeciwbieżnym często stosuje się model *Eulera* [1, 2], który traktuje fazy rozproszone jako półciągłe.

W niniejszej pracy przedstawiono wyniki wstępnego modelowania reaktora przeciwbieżnego. Przeprowadzono symulacje przepływu płynu przez reaktor osobno dla cieczy oraz dla gazu. W obydwu przypadkach nie uwzględniano wymiany masy, zastosowano tak zwany *zimny przepływ*. Z uwagi na poufność danych nie przedstawiono w pracy szczegółowej geometrii reaktora, a jedynie jej fragmenty.

Model reaktora

Geometrię reaktora wraz z generowaniem siatki numerycznej aparatu wykonano w programie *Gambit 2.4.6*. Z uwagi na złożoną geometrię reaktora utworzono tylko fragment geometrii zbudowany z 1 segmentu, w którym występują 2 półki i elementy chłodnicze. Płaszczyzny XY i YZ, które przecinały geometrię w pionie, zdefiniowano jako symetrie. Początkowo wygenerowano siatkę tetrahedralną, jednak w celu skrócenia czasu obliczeń zastosowano siatkę polihedralną. Utworzone siatki zawierały około 2,0 mln komórek obliczeniowych. Fragmenty geometrii z wygenerowanymi siatkami przedstawiono na rys. 1.

Modelowanie numeryczne

Symulacje numeryczne półkowego reaktora przeciwbieżnego wykonano z zastosowaniem pakietu *CFD Fluent 6.3.26* firmy *ANSYS*. Przeprowadzono wstępne modelowanie numeryczne osobno dla 2 płynów. Pierwsza symulacje dotyczyła laminarnego przepływu cieczy, która wpływała od góry do reaktora. Jej wlot do aparatu zdefiniowano jako *velocity inlet*. Druga część modelowania dotyczyła turbulentnego przepływu gazu, wpływającego od dołu do reaktora. Wlot gazu zdefiniowano jako *mass flow inlet*.

Podstawowe równania mechaniki płynów, czyli równanie ciągłości i momentu pędu przedstawiono odpowiednio za pomocą równań [3]:

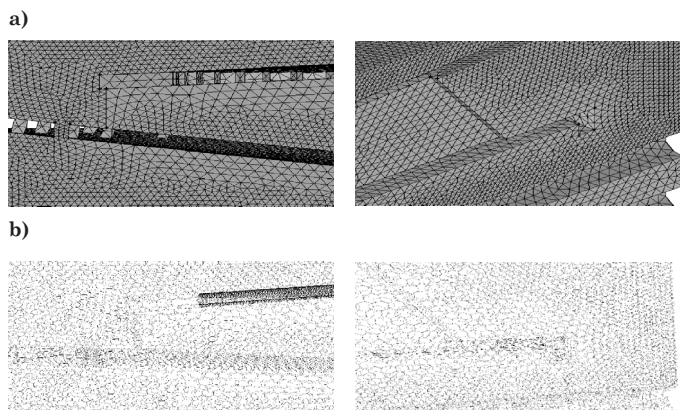
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \text{div}(\mu \text{grad} \mathbf{u}) - \text{div}(p \mathbf{I}) + \rho \mathbf{g} \quad (2)$$

W celu domknięcia układu równań zastosowano standardowy model $k-\epsilon$, który jest najczęściej stosowanym modelem burzliwości, wraz ze standardowymi funkcjami przyściennymi. Równania transportu energii k i jej dyssypacji ϵ przyjmują postać [3]:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \text{div}(k \bar{\mathbf{u}}) = \text{div} \left(\frac{v_t}{\sigma_k} \text{grad} k \right) + P - \epsilon \quad (3)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \text{div}(\epsilon \bar{\mathbf{u}}) = \text{div} \left(\frac{v_t}{\sigma_\epsilon} \text{grad} \epsilon \right) + C_{\epsilon_1} \frac{P \epsilon}{k} - C_{\epsilon_2} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (4)$$



Rys. 1. Porównanie siatek tetrahedralnych (a) z polihedralnymi (b)

W powyższych równaniach ν_t jest kinematycznym współczynnikiem lepkości wirowej, $C_{\varepsilon 1}$ oraz $C_{\varepsilon 2}$ są stałymi empirycznymi modelu, natomiast σ_κ i σ_ε burzliwymi liczbami Prandtla. Lokalna produkcja fluktuacji wirowych, P , zależy od iloczynu kowariancji naprężeń Reynoldsa i gradientu prędkości średniej wyrażoną równaniem [3]:

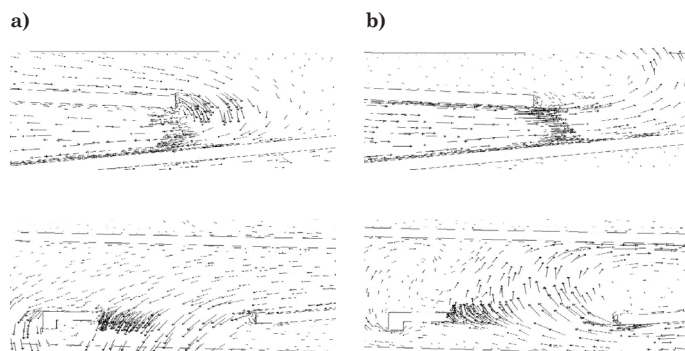
$$P \equiv -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (5)$$

Wyniki symulacji

Definiując przepływy dla cieczy jak i gazu uwzględniano siły grawitacji. Jako warunki początkowe określono prędkość dla cieczy 30 m/s natomiast dla gazu 100 m/s. Dla cieczy prędkość maksymalna osiągnęła wartość 33,6 m/s. W przypadku gazu jej wartość sięgała nawet 2700 m/s w nielicznych miejscach reaktora.

W wyniku przeprowadzonych wstępnych symulacji komputerowych uzyskano lokalne wartości prędkości w reaktorze. Przedstawiono kontury prędkości w wybranych fragmentach, części górnej i dolnej, reaktora osobno dla cieczy (Rys. 2) oraz dla gazu (Rys. 3). W celu porównania kierunku przepływu

obu płynów sporządzono również mapy wektorowe prędkości pokazane na rys. 4.



Rys. 4. Wektory prędkości przepływu cieczy (a) i gazu (b)

Podsumowanie i wnioski

Przeprowadzono wstępne symulacje, w których sprawdzano tak zwany *zimny przepływ* dla każdego ze składników osobno. Na podstawie map wektorowych prędkości określono kierunek przepływu, który jest zgodny z założeniami.

Z wstępnego modelowania numerycznego półkowego reaktora przeciwprądowego wynika, iż utworzona geometria oraz siatki mogą służyć do dalszych obliczeń. W związku z tym możliwa jest symulacja przepływu płynu dwufazowego w modelowanym aparacie.

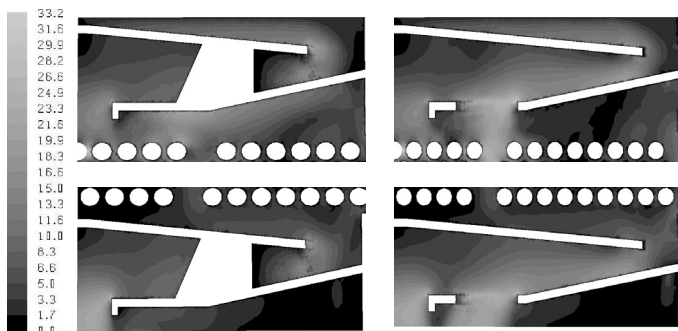
Oznaczenia

- C_ε – stały współczynnik modelu,
- g – przyciąganie ziemskie, [m/s²],
- I – tensor jednostkowy,
- P – produkcja energii kinetycznej burzliwości, [m²/s³],
- p – ciśnienie statyczne, [Pa],
- u – prędkość, [m/s],
- ε – szybkość dyssypacji energii kinetycznej fluktuacji prędkości, [m²/s³],
- ν – kinematyczna lepkość wirowa, [m²/s],
- σ – burzliwa liczba Prandtla,
- μ – dynamiczny współczynnik lepkości płynu, [Pa·s],

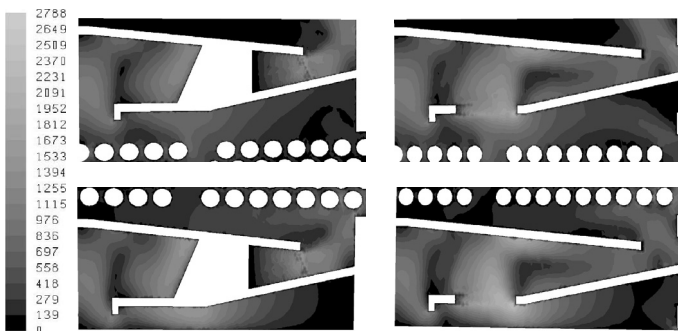
LITERATURA

1. C. G. Sun, F. H. Tin, A. Afacan, K. Nandakumar, K. T. Chuang: Inst. Chem. Eng. **78**, part A, (2000).
2. Y. Yuan, M. Han, Y. Cheng, D. Wang, Y. Jin: Chem. Eng. Sc. **60**, 6210 (2005).
3. Z. Jaworski: Numeryczna mechanika płynów w inżynierii chemicznej i procesowej, Warszawa, EXIT, (2005).

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



Rys. 2. Kontury prędkości przepływu cieczy na wlocie i wlocie z reaktora



Rys. 3. Kontury prędkości przepływu gazu na wlocie i wlocie do reaktora