

Paulina PIANKO-OPRYCH, Zdzisław JAWORSKI

e-mail: paulina.pianko@zut.edu.pl

Instytut Inżynierii Chemicznej i Procesów Ochrony Środowiska, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny, Szczecin

Modelowanie numeryczne LES burzliwego przepływu dwufazowego ciecz – ciecz w mieszalniku statycznym SMX

Wstęp

Przepływy wielofazowe w mieszalniku statycznym SMX występują często w wielu gałęziach przemysłu, między innymi w przemyśle chemicznym, farmaceutycznym, spożywczym czy też produkcji tworzyw sztucznych. Tematyce tej poświęcono jednak niewiele uwagi, o czym świadczy mała liczba prac głównie doświadczalnych [1–4]. W zakresie zastosowania modeli numerycznej mechaniki płynów procesów wielofazowych można wymienić pojedyncze publikacje [5–8]. Das *i in.* [5] zaproponowali dwa teoretyczne modele, służące do opisu procesu rozrywania kropeł w mieszalniku SMX w zakresie niskich i średnich wartości liczb *Reynoldsa*. Uzyskali dobrą zgodność (5%) pomiędzy przewidywanymi i doświadczalnymi wartościami średnich rozmiarów kropeł. Liu *i in.* [6] oraz Fourcade [7] także uzyskali dużą zgodność wyników modelowania numerycznego przepływu dwufazowego z wynikami pomiarów w zakresie przepływów laminarnych i przejściowych. Weryfikację przeprowadzono w oparciu o porównanie wartości spadku ciśnienia, prędkości, rozkładów stężeń i kropeł cieczy w przestrzeni analizowanego mieszalnika. Niezgodność w dokładności przewidywań zmian stężeń w mieszalniku statycznym w zakresie przepływu laminarnego przy użyciu standardowych kodów CFD i siatki numerycznej o średnim stopniu gęstości odnotowali Hirschberg *i in.* [8], którzy stwierdzili znaczące przeszacowanie stopnia zmieszania. Przyczynę upatrywano w wystąpieniu błędów numerycznych, między innymi dyfuzji numerycznej, będącej konsekwencją zastosowania niewłaściwej siatki numerycznej o zbyt niskim stopniu zagęszczenia komórek obliczeniowych w miejscach wysokich gradientów. W celu polepszenia dokładności przewidywań Hirschberg *i in.* [8] zmodyfikowali siatkę obliczeniową oraz uwzględnili wpływ dyfuzji molekularnej na rozkład stężeń mieszanych cieczy poprzez użycie schematu *Monte Carlo*. Wymienione powyżej prace numeryczne dotyczą modelowania przepływu dwufazowego przy analizowaniu procesu laminarnego bądź przejściowego. Natomiast modelowanie numeryczne CFD przepływu burzliwego dwufazowego w mieszalniku SMX nie zostało w pełni opracowane [9].

W pracy przedstawiono wyniki modelowania przepływu burzliwego dwufazowego typu ciecz – ciecz wykorzystując podejście symulacji wielkowirowych (*Large Eddy Simulations*) oraz metodę uśrednianie *Reynoldsa* równań *Naviera-Stokesa* (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*). W przypadku podejścia LES duże wiry są rozwiązywane bezpośrednio, podczas gdy małe wiry są modelowane. W przypadku podejścia RANS efekt działania wszystkich wirów ujęty jest w sposób uśredniony z wykorzystaniem modeli burzliwości. Analizie poddano wpływ oddziaływania siły odśrodkowej związanej z różnicą gęstości cieczy na rozkład modelowanych cieczy w przestrzeni mieszalnika SMX.

Model matematyczny

Obliczenia przepływu burzliwego dwufazowego wykonano podobnie, jak w pracy [10] przy zastosowaniu standardowego ujęcia *Eulera*, na bazie modelu *Mixture* w połączeniu z równaniami na kinetyczną energię burzliwości i szybkość dyssypacji kinetycznej energii burzliwości w ramach realizacji podejścia RANS oraz przy użyciu metody LES z modelem lepkości podsiatkowej *Smagorinsky'ego-Lilly*. W metodzie LES lokalne wartości prędkości i udziału objętościowego w równaniach transportu zostały zastąpione przez wartości odfiltrowane po części spektrum fluktuacji. W wyniku operacji filtrowania uzyskano wyrażenie, opisujące naprężenia podsiatkowe [11]. Do określenia wiel-

kości podsiatkowej lepkości burzliwej, μ_T , zastosowano model *Smagorinsky'ego-Lilly*:

$$\mu_T = \rho_m L_s^2 |\bar{S}| \quad (1)$$

gdzie: ρ_m – gęstość mieszaniny [kg/m^3], L_s – droga mieszania w skali podsiatkowej [m], $|\bar{S}|$ – wielkość tensora deformacji [1/s].

W celu analizy poziomu zmian stężeń mieszanych cieczy zastosowano wskaźnik efektywności mieszania, *COV*, będący stosunkiem odchylenia standardowego z rozkładu stężenia składnika do średniej wartości jego stężenia, opisany równaniem:

$$COV = \frac{1}{\bar{X}} \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2} \quad (2)$$

gdzie: \bar{X} – średnie stężenie składnika, N – liczba danych pomiarowych. Inna definicja wskaźnika efektywności mieszania jest funkcją stosunku L/D , długości mieszalnika, L , do jego średnicy, D :

$$COV = a \exp\left(-\frac{bL}{D}\right) \quad (3)$$

gdzie: a i b są parametrami zależnymi od rodzaju mieszalnika, właściwości i proporcji mieszanych płynów oraz szybkości przepływu. Parametr b określa szybkość zmniejszania wartości wskaźnika *COV* na jednostkę długości mieszalnika, ma on wartość dodatnią. Pahl i *Muschelknautz* [1], *Allocca* [2], *Grosz-Roll* [3] oraz *Cybulski* i *Werner* [4] oszacowali wartości parametrów a i b z danych doświadczalnych dla mieszalnika SMX przy stosunku lepkości cieczy ($\mu_d - \mu_c$) > 1 i przepływie laminarnym. Dla przepływu burzliwego w literaturze [3] dostępne są wartości parametrów a i b jedynie dla mieszalnika SMV i wynoszą one $a \approx 1,7$ i $b \approx 0,755$. Wartości parametrów a i b dla mieszalnika SMX w przepływie laminarnym oszacowano jako odpowiednio równe $a \approx 15$ i $b \approx 0,505$ [3, 4].

Warunki modelowania

Symulacje numeryczne dwufazowego przepływu typu ciecz – ciecz przeprowadzono dla mieszalnika statycznego, składającego się z sześciu wkładek SMX obróconych względem siebie o kąt 90°. Geometrię i siatkę niestrukturalną zawierającą 854 tysiące komórek obliczeniowych (854 k) wygenerowano w programie *Gambit 2.4.5*. Dokładne wymiary mieszalnika SMX i pojedynczej wkładki wraz z charakterystyką siatki numerycznej przedstawiono w pracy [10].

Obliczenia numeryczne przeprowadzono przy zastosowaniu komercyjnych kodów CFD firmy *Fluent 6.3.26*. Modelowanie przepływu dwufazowego wykonano dla wody, reprezentującej fazę ciągłą, o gęstości $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 998,2$ [kg/m^3] i lepkości $\mu_{\text{H}_2\text{O}} = 0,001$ [Pa·s], fazą rozproszoną były krople oleju silikonowego o gęstości $\rho_{\text{olej}} = 900$ [kg/m^3] i lepkości $\mu_{\text{olej}} = 0,0009$ [Pa·s]. Faza rozproszona stanowiła 1% objętościowy mieszaniny dwufazowej. W obu podejściach zgodnie z założeniami modelu *Mixture* przyjęto stałą wartość rozmiaru kropeł niezależnie od warunków przepływu, którą oszacowano wykorzystując zależność zaproponowaną przez *Streiffa* [12]. Średnia wartość średnicy *Sautera* dla mieszalnika SMX dla liczby *Reynoldsa*, $Re = 18000$, liczby *Webera*, $We = 350,3$ oraz stosunku lepkości cieczy ($\mu_d - \mu_c$) = 0,9, wynosiła $d_{32} = 0,609$ [mm]. W ramach obu podejść numerycznych LES i RANS przeprowadzono obliczenia CFD dla trzech przypadków układów o różnej relacji gęstości fazy ciągłej, ρ_c , i rozproszonej, ρ_d . Relacje gęstości faz przedstawiały się następująco: w przypadku 1: $\rho_c = \rho_{\text{H}_2\text{O}} > \rho_d = \rho_{\text{olej}}$, w przypadku 2: $\rho_c = \rho_d = \rho_{\text{olej}}$ oraz w przypadku 3: $\rho_c = \rho_{\text{olej}} < \rho_d = \rho_{\text{H}_2\text{O}}$.

W celu skrócenia czasu obliczeń symulacje wielkowirowe uruchamiano z rozwiązania uzyskanego z symulacji RANS dla stanu ustalonego. Zastosowano krok czasowy 0,001 [s], w ramach którego wykonywano 40 wewnętrznych iteracji, całkowita liczba kroków czasowych wynosiła 500, co pozwoliło na uzyskanie zbieżności iteracji na poziomie reszduów około $1 \cdot 10^{-5}$, a łączny symulowany czas wyniósł 0,5 [s]. Wyniki symulacji numerycznych LES i RANS porównano w połowie wysokości piątej wkładki SMX dla trzech punktów umieszczonych w odległości promieniowej od osi rury, $R_1 = 0,009375$ [m], $R_2 = 0,00625$ [m], $R_3 = 0,003125$ [m]. W punktach tych rejestrowano lokalne wartości chwilowej składowej osiowej prędkości mieszanki, chwilowe wartości składowej osiowej wirowości i skrętności pola prędkości.

Wyniki modelowania

Poprawność przewidywań spadku ciśnienia w mieszalniku SMX została zweryfikowana w oparciu o porównanie wartości współczynnika oporów przepływu f wyznaczonych z symulacji LES i RANS z danymi literaturowymi [4, 13, 14]. Najlepszą zgodność otrzymano z wartością $f = 1,036$ podaną przez Li i in. [14]. W tab. 1 przedstawiono oszacowane w symulacjach wartości współczynników f wraz z błędem względnym δ wyznaczonym w funkcji Li i in. [14].

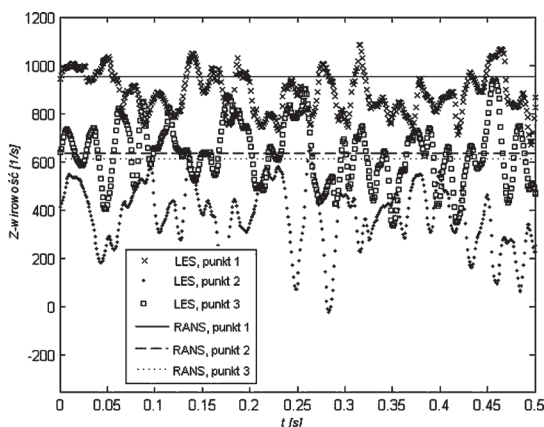
Następnie porównano przebiegi wartości składowej osiowej wirowości pola prędkości z symulacji LES z wartościami otrzymanymi dla RANS w obszarze połowy piątej wkładki SMX w punktach R_1 , R_2 i R_3 .

Tab. 1. Współczynnik oporów przepływu f i błąd względny δ dla mieszalnika SMX

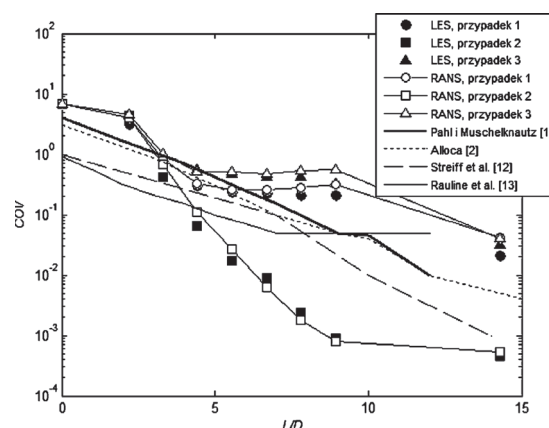
L/D=14,3	RANS, $k-\epsilon$		LES	
	$f[-]$	δ [%]	$f[-]$	δ [%]
$\rho_{c1} > \rho_{d1}$	1,136	8,77	0,952	8,83
$\rho_{c2} = \rho_{d2}$	1,142	9,31	0,966	7,25
$\rho_{c3} < \rho_{d3}$	1,033	0,29	0,960	7,92

Średnie LES wartości Z-wirowości pola prędkości wynosiły 877,1; 734 i 501 [1/s], a RANS odpowiednio 952; 635 i 611 [1/s], podczas gdy lokalne LES wartości Z-wirowości ulegały silnym fluktuacjom przedstawionym na rys. 1. Występowanie silnych fluktuacji przepływu płynów w mieszalniku SMX powoduje powstanie lokalnych oddziaływań siły odśrodkowej, co sprzyja lokalnej segregacji mieszanych cieczy przy występowaniu różnicy gęstości.

Wskaźnik efektywności mieszania COV został przedstawiony na rys. 2. Krzywe COV dla LES charakteryzują się przebiegiem zbliżonym do krzywych doświadczalnych [1, 2, 12, 13] uzyskanych dla cieczy rozpuszczalnych w sobie. Wskaźniki COV dla przypadku 1 i 3 po przejściu płynów przez obszar trzeciej wkładki SMX mają praktycznie stałe wartości, podczas gdy dla przypadku 2 wskaźnik COV wykazuje dalsze tendencje malejące. W przypadku liczby *Reynoldsa*, $Re = 18000$ krzywe COV uzyskane z symulacji LES i RANS praktycznie się pokrywają, nie występują tu tak znaczące różnice w ich przebiegach, jakie zanotowano



Rys. 1. Składowa osiowa wirowości pola prędkości w funkcji czasu w mieszalniku SMX dla przypadku 1 i $Re = 18000$: porównanie wyników LES z RANS



Rys. 2. Zależność wskaźnika efektywności mieszania COV od drogi mieszania L/D dla mieszalnika SMX dla $Re = 18000$: porównanie wyników LES z danymi literaturowymi [1, 2, 13, 12]

w przypadku niższych wartości liczb *Reynoldsa*, $Re = 5000$ i 10000 przedstawionych w pracy [10].

Przeprowadzono oszacowanie wartości parametrów a i b w równaniu (3), opisującym wskaźnik efektywności mieszania COV . Otrzymane wartości zestawiono w tab. 2. Parametry a i b różnią się nieznacznie od wartości literaturowych [1–4], różnice te jednak wynikają między innymi z tego, że stosunek L/D dla układów doświadczalnych wynosił w przybliżeniu 11, natomiast w modelowaniu numerycznym przyjęto 14,3. Ponadto parametry a i b wyznaczone dla warunków przepływu laminarnego, jedynie Grosz-Roll [3] zdefiniował te wartości dla przepływu burzliwego, ale dla wkładki SMV, charakteryzującej się nieco inną konstrukcją od wkładki SMX. Najbliższe wartości parametrów a i b uzyskano dla przypadku 2 symulacji LES. Krzywe COV uzyskane z symulacji LES i RANS dobrze zostały opisane funkcjami wykładniczymi o współczynniku dopasowania R^2 , wynoszącym dla większości przypadków powyżej 0,86.

Tab. 2. Parametry a i b oraz parametr dopasowania funkcji wykładniczej R^2 w równaniu (3) na wskaźnik efektywności mieszania COV dla mieszalnika SMX

L/D=14,3	RANS, $k-\epsilon$			LES		
	a	b	R^2	a	b	R^2
$\rho_{c1} > \rho_{d1}$	3,74	0,34	0,83	4,12	0,38	0,91
$\rho_{c2} = \rho_{d2}$	4,66	0,81	0,86	3,96	0,79	0,87
$\rho_{c3} < \rho_{d3}$	5,03	0,33	0,86	5,36	0,36	0,92

Wnioski

Przeprowadzone symulacje numeryczne dla dwóch podejść LES i RANS pozwoliły stwierdzić, że w przypadku liczby *Reynoldsa* $Re = 18000$ segregacja mieszanych cieczy dla przypadku 1 i 3 wskutek oddziaływania siły odśrodkowej jest na zbliżonym poziomie.

LITERATURA

- [1] M.H. Pahl, E. Muschelknautz: Int. Chem. Eng., **22**, 197 (1982).
- [2] P. Allocca: Fib.Prod., **8**, 12 (1982).
- [3] F. Grosz-Roll: Int.Chem.Eng., **20**, 542 (1980).
- [4] A. Cybulski, K. Werner: Int. Chem. Eng., **26**, 1, 171 (1986).
- [5] P.K. Das, J. Legrand, P. Morancais, G. Carnelle: Chem. Eng. Sci., **60**, 231 (2005).
- [6] S. Liu, A.N. Hrymak, P.E. Wood: Chem. Eng. Sc., **61**, 6, 1753 (2006).
- [7] E. Fourcade: Chem. Eng. Sc., **56**, 23, 6729 (2001).
- [8] S. Hirschberg, P. Mathys, A. Rutti: Proc. 12th Eur. Conf. on Mixing, Bologna, Italy, 2006, 1-8.
- [9] F. Theron, N. Le Sauze, A. Ricard: Proc. ISMIP VI, Niagara Falls, Ontario, Canada, 2008.
- [10] P. Pianko-Oprych, Z. Jaworski: Chemical Papers, **64**, 2, 203 (2010).
- [11] B.E. Lauder, D.P. Spalding: Comp. Meth. App. Mech. & Eng., **3**, 2, 269 (1974).
- [12] F. Streiff: Revue Technique Sulzer, **3**, 108 (1977).
- [13] D. Rauline, J.M. Le Blevec, J. Bousquet, P.A. Tanguy: Chem. Eng. Res. & Design, **78**, Part A, 389 (2000).
- [14] H. Li, C. Fasol, L. Chopin: Chem. Eng. Res. & Design, **75**, 792 (1997).