

Halina MURASIEWICZ, Zdzisław JAWORSKI

e-mail: zdzislaw.jaworski@zut.edu.pl

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

Modelowanie metodami URANS i LES przepływu dwufazowego w mieszalniku statycznym z wkładkami typu Kenics

Wstęp

Proces rozpraszania płynu w ciągłej fazie ciekłej jest prawdopodobnie najbardziej znanym procesem mieszania w przemyśle, występującym najliczniej w przemyśle chemicznym, spożywczym, farmaceutycznym oraz im pokrewnych [1]. Przepływ dwóch wzajemnie nierozpuszczalnych się cieczy i mieszanie takich układów często analizowany był w literaturze, zarówno eksperymentalnie jak i numerycznie w odniesieniu do różnych mieszalników dynamicznych i statycznych [2–5]. W przypadku układów ciecz – ciecz, gdzie jedna faza jest rozproszona w postaci małych kropeł w drugiej, ważna jest znajomość rozkładu wielkości kropeł, którego charakter zależy od warunków przepływu. Z praktycznego punktu widzenia jest niemożliwe wytworzenie układu dyspersyjnego o jednakowych kropełach fazy rozproszonej ze względu na szeroki zakres właściwości i warunki przepływu. Wiedza o rozkładzie wielkości kropeł, charakter i rozwój zmian kropeł wraz ze zmianą źródła energii ma istotne znaczenie w tworzeniu emulsji i polimeryzacji zawiesin. Znaczna ilość prac, które można znaleźć w literaturze dotyczy przewidywania rozkładu wielkości kropeł w burzliwych dyspersjach ciecz-ciecz w mieszalnikach dynamicznych. Większość z nich korzysta z koncepcji burzliwej kaskady energii do przewidywania maksymalnych stabilnych średnic kropeł, odwołując się do teorii *Hinze-Kolmogorowa* [6, 7]. Na bazie modeli matematycznych opisujących rozkład wielkości kropeł dla mieszalników dynamicznych wyprowadzono odpowiednie korelacje dla mieszalników statycznych, w tym dla mieszalnika Kenics. W literaturze spotkano się z kilkoma propozycjami wyznaczania wartości maksymalnej i minimalnej stabilnej kropli oraz średniego rozmiaru kropeł dla mieszalnika Kenics. Maksymalna średnica kropli, d_{\max} , zależy od fluktuacji przepływu i związanej z nią fluktuacji prędkości. Najpopularniejszą formą równania jest równanie zaproponowane przez *Middlemana* [8]:

$$d_{\max} = k_1 \left(\frac{\sigma}{\rho_c} \right)^{0,6} \left(\frac{\rho_c}{\rho_d} \right)^{0,2} \varepsilon^{0,4} \quad (1)$$

gdzie stała k_1 wynosi 1,0, a wartość d_{\max} wynosi około $d_{\max} = 1,5d_{32}$ (d_{32} , średnica *Sautera*).

Dla cieczy lepkich *Calabrese* i *Berkman* [9] wyprowadzili zależność na maksymalną średnicę kropeł fazy rozproszonej, przedstawioną w równaniach:

$$d_{\max} = k_1 \left(\frac{\sigma}{\rho_c} \right)^{0,6} \left(\frac{\rho_c}{\rho_d} \right)^{0,2} \varepsilon^{0,4} (1 + Vi) \quad (2)$$

gdzie

$$Vi = \mu_d \frac{\bar{V}}{\sigma} \left(\frac{\rho_c}{\rho_d} \right)^{0,5} \quad (3)$$

Natomiast dla mieszalnika SMX oraz cieczy rozproszonej o niskiej lepkości *Streiff* i inni [10] zaproponowali empiryczne równanie na d_{\max} wyrażone zależnością

$$d_{\max} = 0,93 \left(\frac{\sigma}{\rho_c} \right)^{0,6} \left(\frac{\rho_c}{\rho_d} \right)^{0,1} \varepsilon^{0,4}, \quad (4)$$

gdzie dla wszystkich cieczy równanie to wygląda następująco [11]:

$$d_{\max} = 1(1 + 1,7C_v) \left(\frac{\sigma}{\rho_c} \right)^{0,6} \left(\frac{\rho_c}{\rho_d} \right)^{0,1} \varepsilon^{0,4} 0,9^{0,6} (1 + 0,3I_f)^{0,6} \quad (5)$$

Według *Streiffa* [11] wartość najmniejszej stabilnej kropli d_{\min} można wyrazić jako $d_{\min} = 0,2d_{\max}$.

Zależności do oszacowania średniego rozmiaru kropeł fazy rozproszonej zostały wyprowadzone dla mieszalnika Kenics przez wielu badaczy [8, 9, 12, 13], z których najczęściej spotyka się tę zaproponowaną przez *Middlemana* [8]:

$$\frac{d_{32}}{D} = \frac{K}{We^{0,6}}, \quad (6)$$

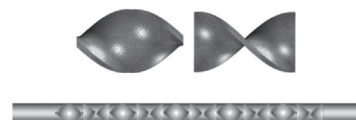
gdzie $K = 0,49$ dla mieszalnika Kenics i przepływu burzliwego oraz cieczy o niskim stosunku gęstości i lepkości [9].

Prezentowana praca ma na celu określenie zmian wartości ε_{\max} podczas przepływu burzliwego w mieszalniku Kenics wykorzystując dwa podejścia numeryczne przepływu: symulacje wielkowirowe oraz niestacjonarne RANS. Otrzymane informacje pozwolą dodatkowo wyznaczyć wartości najmniejszej i największej średnicy stabilnych kropeł oraz określić wpływ wartości ε_{\max} na nie. W poprzedniej pracy autorów [14] wyznaczono dla obu tych podejść numerycznych wartości k i ε w tym mieszalniku, co pozwoliło na określenie obszaru, w którym głównie będzie występować intensywne rozbijanie kropeł.

Procedura modelowania i materiał

Mieszalnik Kenics

Obiektem badań był mieszalnik statyczny wyposażony w 10 wkładek typu Kenics, którego wymiary geometryczne wynoszą odpowiednio: średnica $D = 0,025$ m, długość $L = 0,515$ m oraz długość odcinka wlotowego i wylotowego 0,07 m. Geometria i siatka numeryczna o gęstości wynoszącej około 900 tysięcy komórek (900 k) zostały stworzone za pomocą preprocesora *Gambit 2.0*. Schematycznie obiekt badań pokazano na rys. 1.



Rys. 1. Geometria mieszalnika Kenics

Materiał

Modelowanie numeryczne wykonano dla trzech przypadków (A, B i C) różniących się między sobą gęstością fazy ciągłej i rozproszonej, za pomocą komercyjnego pakietu *Fluent 12*. W przypadku A $\rho_c = 998,2$ kg/m³ > $\rho_d = 900$ kg/m³, w przypadku B $\rho_c = \rho_d = 900$ kg/m³ oraz w przypadku C $\rho_c = 900$ kg/m³ < $\rho_d = 998,2$ kg/m³. Cieczami procesowymi były dwie wzajemnie nierozpuszczalne cieczce: woda jako faza ciągła oraz krople oleju silikonowego – faza rozproszona, o stosunku objętościowym wynoszącym 99:1, analogicznym do warunków doświadczalnych [15]. Przy tak niewielkim udziale fazy rozproszonej (1% obj. mieszaniny) można pominąć wpływ procesu koalescencji, zgodnie z założeniami dostępnymi w pracy [7]. Napięcie powierzchniowe wynosiło 0,0374 N/m.

Modele numeryczne

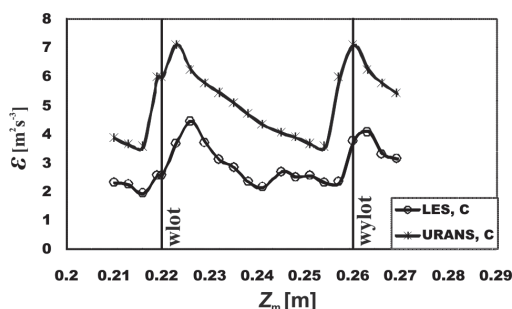
Przepływ dwufazowy był modelowany za pomocą podejścia *Eule- ra*, dostępnego w kodzie *Fluent* jako opcja *Mixture*. Do modelowania przepływu burzliwego wykorzystano metodę URANS z modelem burzliwości $k-\varepsilon$ oraz metodę symulacji wielkowirowych (LES) z modelem dynamicznym kinetycznej energii burzliwości skali podsiatkowej (*Dynamic Kinetic Energy Subgrid-Scale Model*). W obu podejściach analizowano przepływ dla liczby *Reynoldsa* wynoszącej 10 000. Podstawowe równania modeli wykorzystywanych w obu tych podejściach symulacyjnych przedstawiono w poprzedniej pracy autorów [14]. Wartość średnia mikroskali *Kolmogorowa* [1] dla analizowanej liczby *Re* wyniosła 280 μ m.

Wyniki badań

W kodzie CFD zastosowano do symulacji numerycznych LES i URANS algorytm SIMPLE do rozwiązywania równań różniczkowych. Dodatkowo, wykorzystano standardowe wartości współczynników podrelaksacji w celu ustabilizowania procesu obliczeniowego oraz schemat różnicowy drugiego rzędu (*II order upwind*) dla równań dyfuzyjnych w symulacjach URANS. W symulacjach wielkowirowych przyjęto podobne założenia jak w URANS za wyjątkiem równania dla pędu, gdzie przyjęto schemat *Bounded Central Differencing*. Takie podejście pozwala zwiększyć stabilność i zbieżność procesu obliczeń. Symulacje numeryczne dla badanych przypadków, wykonywano do momentu uzyskania zbieżności wartości znormalizowanych sum reszt numerycznych wynoszących około 10^{-7} .

Wielkość kroku czasowego wynosiła 0,001s i w ramach jednego kroku realizowano 50 wewnętrznych iteracji. Parametry te ustalono na podstawie badań wstępnych [14]. Łączny czas symulacji wyniósł 2 s, co odpowiada 2000 krokom czasowym i jest on znacznie wyższy od średniego czasu przebywania, który równy jest $\tau = 0,92$ s.

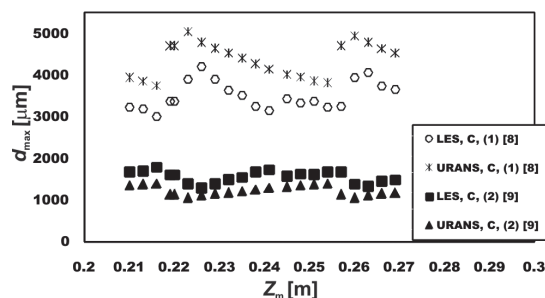
Na rysunku 2 przedstawiono obliczone wartości ε w płaszczyznach przekroju poprzecznego piątej wkładki, z zaznaczonym wlotem i wylotem wkładki, dla przypadku C i obu podejść numerycznych.



Rys. 2. Rozkład szybkości dyssypacji kinetycznej energii burzliwości wzdłuż długości piątej wkładki *Kenics*, podejście URANS i LES, Re 10 000, przypadek C, $t = 2$ s

Analizując krzywe rozkładu wartości ε w obszarze piątej wkładki za uważano, że charakter zmian w obu przypadkach jest do siebie zbliżony. Oznacza to, że proces rozbicia cząsteczek fazy rozproszonej zachodzić będzie z różną intensywnością w zależności od obszaru wkładki. Dla metody URANS wartości ε są prawie dwukrotnie większe, co może być spowodowane zastosowaniem różnych modeli burzliwości w obu tych podejściach. W obu metodach maksymalne wartości ε uzyskano na wlocie do oraz na wylocie z wkładki, co przekłada się na największe działanie sił ścinających tym regionie. Prawdopodobnie, w mieszalniku statycznym *Kenics*, proces rozbicia kropli będzie przebiegał głównie w początkowej i końcowej części wkładki *Kenics*.

Podobnie dla dwóch pozostałych przypadków (A i B), prezentowanych w pracy autorów [14], zaobserwowano zbliżony charakter zmian, co pozwoliło na wyciągnięcie podobnych wniosków. Dokładniejszy opis badań jak i dyskusję uzyskanych wyników dotyczących szybkości dyssypacji kinetycznej energii burzliwości zawarto w pracy [14]. Znajomość wartości jak i natura zmian rozkładu szybkości dyssypacji kinetycznej energii burzliwości pozwoliła na wyznaczenie wartości maksymalnej oraz minimalnej stabilnej kropli wykorzystując zależności proponowane w pracach [8, 9]. Podobnie, jak w przypadku analizy zmian wielkości ε dla obszaru piątej wkładki, stworzono rozkłady wartości d_{max} , przedstawione na rys. 3. W oparciu o ten rysunek, stwierdzono że wartości maksymalnej stabilnej kropli wyznaczone z (1) zmieniają się w przedziale od 2993 do 4181 μm dla danych uzyskanych z modelowania LES, natomiast dla metody URANS wartości te zawierają się w przedziale od 3575 do 5047 μm . Przyczynę różnic występujących w wartościach d_{max} pomiędzy dwiema metodami numerycznymi upatruje się w uzyskaniu wyższych wartości ε dla metody URANS. Analizując wartości d_{max} wyznaczone z zależności proponowanej w [9] zauważono, iż są one co najmniej dwukrotnie mniejsze od tych samych obliczonych z równania (1). Na podstawie rys. 3 stwierdzono, że obszary występowania maksymalnych wartości ε pokrywają się z obszarem



Rys. 3. Rozkład wartości d_{max} wzdłuż długości piątej wkładki *Kenics*, podejście URANS i LES, Re 10 000, przypadek C

najwyższych wartości d_{max} . Wniosek ten jest jedynie słuszny dla danych uzyskanych z (1). Odwrotną sytuację zaobserwowano dla wartości d_{max} wyznaczonych z (2). Tam gdzie występowały wartości ε_{max} teraz dla danych wyznaczonych z (2) występują najmniejsze wartości d_{max} . Dla wartości d_{max} uzyskanych z (1) i (2) rozkład ich wartości największej i najmniejszej jest odwrotny.

Kolejnym etapem prac było oszacowanie wartości najmniejszej stabilnej kropli d_{min} w mieszalniku *Kenics*. W tym celu posłużono się zależnością zaproponowaną przez *Streiffa* [11]. Wartości d_{min} dla metody LES i URANS zmieniają się w przedziale odpowiednio od 598 do 836 μm oraz od 751 do 1010 μm . Podobnie jak w przypadku d_{max} wyższe wartości uzyskano dla metody URANS. Wpływ wartości ε_{max} jest podobny do tego, jaki występował w przypadku d_{max} .

Wnioski

Prezentowano cząstkowe wyniki prac związanych z określeniem wartości najmniejszej i największej średnicy stabilnych kropli w mieszalniku *Kenics* oraz wpływu wartości ε_{max} na te średnice. Na podstawie przeprowadzonych badań numerycznych stwierdzono, że wartości ε_{max} występują na początku i na końcu wkładki *Kenics*, co oznacza że w tych obszarach występuje największe działanie sił ścinających. Prawdopodobnie proces rozbicia kropli będzie występował głównie w tych częściach wkładki. Na podstawie empirycznych równań (1) i (2) oszacowano wartości maksymalnej stabilnej kropli dla obszaru piątej wkładki, natomiast wartość d_{min} oszacowano z zależności zaproponowanej przez *Streiffa* [11]. Wartości te są wyższe o około 20% dla metody URANS. Badania te potwierdzają możliwość uzyskania w mieszalniku *Kenics* stabilnej emulsji. Dokładniejsze informacje o charakterze zmian w mieszalniku zarówno d_{max} , d_{min} oraz d_{32} uzyskuje się po zastosowaniu w symulacjach szczegółowych równań bilansu populacji.

LITERATURA

- [1] E.L. Paul, V.A. Atiemo-Obeng, S.M. Kresta: Handbook of Industrial Mixing – Science and Practice: Wiley-Interscience, 2003.
- [2] F. Theron, N. Le Sauze, A. Ricard Ind. Eng. Chem. Res. **49**, nr 2, 623 (2010)
- [3] J.H. Wu, C.C. Guo, B. Gong, Z.P. Bao: Proc. 2nd Inter. Conf. Model. and Sim., s. 232, Manchester, Wielka Brytania, 21–22 maja, 2009.
- [4] S. Maass, J. Grunig, M. Kraume: Chem. Proc. Eng. **30**, 4, 635 (2009).
- [5] F. Laurenzia, M. Coroneoa, G. Montantea, A. Paglianti, F. Magellia: Chem. Eng. Res. Des. **87**, 4, 507 (2009).
- [6] G. Zhou, S.M. Kresta: Chem. Eng. Sci., **53**, 11, 2063 (1998).
- [7] W. Podgórska: Chem. Eng. Sci., **61**, 2986 (2006).
- [8] S. Middleman: Ind. Eng. Chem. Prod. Dev., **13**, 78 (1974).
- [9] P.D. Berkman, R.V. Calabrese: A.I.Ch.E. Journal **34**, 602 (1988).
- [10] F.A. Streiff, S. Jaffer, G. Schneider: Proc. ISMIP3, Osaka, 107 (1999).
- [11] F.A. Streiff, P. Mathys, T.U. Fishcher: Récents Progrès en Génie des Procédés **11**, 307 (1997).
- [12] P.A. Haas: A.I.Ch.E. Journal, **33**, 987 (1987).
- [13] S.J. Chen, D.R. Libby: 71st Annual AIChE Meeting, Miami, USA, 1978.
- [14] Z. Jaworski, H. Murasiewicz: Chem. Pap. **64**, 2, 182 (2010).
- [15] A.W. Pacek, Aylilanawati, A.W. Nienow: Proc. 3rd Intern. Symp. on Mixing in Indust. Proc., s. 115, Osaka, Japonia, 19–22 września, 1999.

Praca naukowa finansowana ze środków na naukę w latach 2010–2012 jako projekt badawczy promotorski N N209 200238.