Michał DYLAG¹, Jerzy KAMIEŃSKI², Jerzy ROSIŃSKI², Wiesław SZATKO²

mdylag@pk.edu.pl

¹OBR CeBeA – Kraków

²Katedra Aparatury Przemysłowej, Wydział Mechaniczny, Politechnika Krakowska, Kraków

Identyfikacja i modelowanie rozkładów wielkości cząstek dla ustalonych warunków procesu flokulacji

Wstęp

Poprawne projektowanie i prowadzenie procesu flokulacji wymaga między innymi znajomości pełnego opisu zachowań fazy rozproszonej w objętości reaktora – łącznie z dynamiką zmian rozkładów wybranych jej wartości, np. wielkości cząstek – w powiązaniu z warunkami realizacji procesu.

Sformułowanie problemu – cel i metodyka badań

Przyjęta w pracy [1, 2] metodyka badań, oparta o równoległe prowadzenie eksperymentu oraz obliczeń symulacyjnych – pozwala na wyznaczenie oraz porównania otrzymywanych rozkładów wielkości cząstek – powstających w ustalonych warunkach pracy reaktora zbiornikowego, tzn. dla Re = const. Wyniki obliczeń numerycznych wykonanych metodą skończonych objętości, porównano z wynikami eksperymentu. Badania prowadzono w zbiorniku z mieszadłem dla zakresu liczb Reynoldsa $Re = 10^4 \div 2,5 \cdot 10^4$.

Celem zapewnienia *á priori* możliwości dokonywania porównań, oparto się o analizę rozkładów wielkości cząstek pierwotnych oraz flokuł – wyznaczonych dla wszystkich 35 elementów bilansowych nierównomiernej siatki, przyjętej przy dyskretyzacji objętości reaktora.

Na rys. 1 przedstawiono schemat podziału – zaznaczając wybrane elementy 1, 18, 28 – przytaczane w późniejszych analizach.

Wyniki badań – oparte o obliczenia symulacyjne oraz eksperyment, po opracowaniu – przedstawiono w układzie współrzędnych: przesiew odniesiony do całkowitej masy cząstek – zastępcza średnica cząstek/ flokuł; co stwarzało możliwość dokonywania analizy porównawczej charakterów przebiegu zmian rozkładów



Rys. 1. Dyskretyzacji objętości zbiornika reaktora dla rozwiązania równań bilansów populacji

w zakresie od uruchomienia mieszadła do ustalenia warunków (stan quasi-stacjonarny); ze szczególnym uwzględnieniem wpływu startowego stężenia cząstek pierwotnych na analizowane rozkłady dyspergowanych (zawieszonych) cząstek.

Rozkład wielkości cząstek pierwotnych w okresie rozruchowym

Na rys. 2 przedstawiono przebieg zależności względnego przesiewu w funkcji zastępczej średnicy cząstek; na wykresie zaznaczono także punkty startowe (wskazujące początek procesu koagulacji). Przedstawione przebiegi uzyskano dla wartości liczby *Reynoldsa Re* = 10^4 oraz stężenia cząstek pierwotnych $c_p = 1,0$ g/l; podlegającą flokulacji fazę stałą stanowił piasek kwarcowy.

Należy zauważyć, że identyczne wyniki uzyskano dla wszystkich elementów bilansowych siatki służącej dyskretyzacji; oznacza to stwierdzenie przesunięcia rozkładów wielkości w kierunku większych średnic



Rys. 2. Rozkład wielkości cząstek pierwotnych na początku procesu i w stanie ustalonym – w funkcji ich średnicy, dla $Re = 10^4$ (linia ciągła – wartości obliczone, symbole – pomiary)

cząstek. Efekt ten jest wynikiem występowania na początku procesu wysokich stężeń małych cząstek pierwotnych, które w tym okresie stosunkowo łatwo podlegają koagulacji. Wprawdzie nadal znaczna liczba małych cząstek pozostaje w objętości reaktora, jednakże ze względu na swoje wymiary – nie stanowi o całkowitej masie większych cząstek pozostających w układzie.

Na rys. 3 przedstawiono w analogicznym układzie współrzędnych rozkład wielkości flokuł w stanie stacjonarnym reaktora; punkty w lewej części pola wykresu pokazują startowy rozkład wielkości cząstek pierwotnych. Kolejno zaznaczone na wykresie przebiegi w postaci linii przerywanych, rozkłady wielkości cząstek – zostały odniesione do wybranych elementów bilansowych siatki; kryteria wyboru stanowiły różne wartości dyssypacji kinetycznej energii turbulencji. Zdecydowano przedstawić wyniki dla elementów 1, 18 i 28; dla których wartości ε wynoszą odpowiednio $\varepsilon_1 = 0,0019$ W/kg, $\varepsilon_{18} = 0,4$ W/kg i $\varepsilon_{28} = 0,0012$ W/kg. Linia ciągła opisuje uśredniony rozkład cząstek, wyznaczony przez uśrednienie rozkładu flokuł z uwzględnieniem przy obliczaniu wartości dla każdego z 35 elementów bilansowych jego objętości.



Rys. 3. Wyznaczone rozkłady cząstek pierwotnych i flokuł w stanie ustalonym dla różnych elementów objętości reaktora w funkcji ich średnicy; dla $Re = 10^4$ przy stężeniu cząstek pierwotnych $c_p = 1,0$ g/l

Analiza przebiegów pozwala stwierdzić, że z jednej strony – przebieg uśrednionej wartości wielkości flokuł zaledwie nieznacznie odbiega od przebiegów opisujących tę zależność w elementach o niskich wartościach dysypowanej energii ε . Z drugiej strony jednak należy zauważyć występowanie znacznych różnic w rozkładzie wielkości flokuł w elementach bilansowych o zróżnicowanym strumieniu dysypowanej energii. Zasadniczo należy uznać, że w warunkach stacjonarnych ustala się stan równowagi pomiędzy jednoczesnymi procesami koagulacji i rozpadu następującego w wyniku pękania i erozji. W miejscach występowania wyższych wartości ε – wpływ pękania i erozji jest bardziej widoczny, co uwidacznia się występowaniem małych cząstek. Zaobserwowane różnice oznaczają także, że wielkości flokuł z punktu widzenia kinetyki procesu ich tworzenia i rozpadu, wskazują na jego większą szybkość, niż wynikałoby to z konwekcyjnej wymiany elementów objętości wewnątrz reaktora, wywołanej przepływem indukowanym przez mieszadło.

Na rys. 4 zobrazowano analizę porównawczą wyników rozkładu wielkości flokuł, uzyskanych w wyniku obliczeń z modelu [3] oraz wyznaczonych eksperymentalnie.



Rys. 4. Wyznaczone rozkłady cząstek pierwotnych na początku koagulacji i obliczonych w stanie ustalonym dla $Re = 10^4$ i $c_p = 1,0$ g/l – dla różnych elementów siatki dyskretyzacyjnej

W lewej części pola wykresu przedstawiono jako wtórny układ odniesienia – rozkład wielkości cząstek pierwotnych, stanowiący rozkład startowy procesu flokulacji. Symbolami oznaczono wyniki uzyskane w drodze eksperymentu, linie oznaczają wyniki obliczeń uzyskanych z rozwiązania równań bilansów populacji. Kryterium wyboru do analizy elementów bilansowych stanowiła wartość dysypowanej energii: wysoka – element 18 i niska – element 1. Zauważalna jest wyraźna różnica pomiędzy charakterem przebiegu rozkładu wielkości flokuł; szczególnie istotna w skali lokalnej – także w przypadku wyników eksperymentu. Dobra zgodność pomiędzy obliczonymi i wyznaczonymi eksperymentalnie rozkładami wielkości cząstek może być zinterpretowana jako wynik dopasowania parametrów w modelach kinetycznych analizowanych procesów aglomeracji i rozpadu [3]. Uznano to za przesłankę pozwalającą na przyjęcie ich niezmienności w dalej prowadzonych obliczeniach.

Wpływ stężenia cząstek pierwotnych na rozkład wielkości flokuł

Celem analizy wpływu stężenia cząstek pierwotnych c_p na ustalające się rozkłady wielkości flokuł, wybrano wartości $c_p = 0,25$ g/l i $c_p = 0,5$ g/l; wyraźnie zróżnicowane w porównaniu z dotychczas analizowanym przypadkiem $c_p = 1,0$ g/l. Rozkład wielkości cząstek – niezależnie od zmienianego stężenia, pozostawał zgodnie z oczekiwaniem identyczny.

Na rys. 5 zobrazowano wyniki analizy dla stężenia cząstek pierwotnych $c_p = 0.25$ g/l. Symbole trójkątne dotyczą wyników badań eksperymentalnych, linie natomiast odwzorowują wyniki uzyskane z obliczeń symulacyjnych analizowanych rozkładów wielkości flokuł; zestawione wyniki dotyczą elementów bilansowych 1 i 18. Na wykres wprowadzono dodatkowo wyniki uzyskane przy koncentracji flokuł $c_p = 1,0$ g/l w odniesieniu do elementu 1

Analiza przedstawionych przebiegów zmienności rozkładów pozwala stwierdzić, że:

- przy zmniejszonych wartościach koncentracji cząstek pierwotnych c_p , nie występują istotne lokalne różnice w rozkładach wielkości flokuł. Wyniki uzyskane dla elementów 1 i 18 dla wysokich i niskich strumieni energii ε – wyraźnie się pokrywają; obserwuje się zanikania lokalnych różnic.
- następuje ustalenie stacjonarnego rozkładu wielkości flokuł, szczególnie dotyczy to zakresów małych cząstek, przy odpowiadającym stężeniu cząstek pierwotnych wynoszącym $c_p = 1$ g/l.



Rys. 5. Obliczone i zmierzone rozkłady wielkości flokuł w elementach 1 i 18 siatki dla $Re = 10^4$. Linie – wyniki symulacji, symbole – pomiary stężenia cząstek pierwotnych $c_n = 0.25$; 1,0 g/l

Przyczyną ustalonych zjawisk jest następujące zmniejszanie się stężenia cząstek w zbiorniku reaktora, co prowadzi do zmniejszania się liczby cząstek podlegających koagulacji. Ponieważ szybkość aglomeracji cząstek zależy między innymi od kwadratu ich stężenia [3, 4] – obserwuje się jej 16-krotne zmniejszenie – w porównaniu z analizowanymi uprzednio wynikami obliczeń.

W efekcie skutkuje to brakiem możliwości powstawania dużych flokuł, które w obszarach wysokich wartości lokalnych dyssypacji energii – zostają zniszczone. Zatem, w wyniku zmniejszającego się stężenia cząstek pierwotnych, procesy aglomeracji i przeciwstawne im mechanizmy dezaglomeracji (pękanie i erozja) przebiegają w sposób wolniejszy. Oznacza to, że występujące mechanizmy konwekcji nie są w stanie przeciwdziałać lokalnym różnicom w rozkładach wielkości cząstek.

Dla przypadku stężenia cząstek pierwotnych $c_p = 0.5 \text{ g/l} - \text{następuje}$ przesunięcie rozkładów wielkości flokuł w kierunku ich większych wartości, jednakże istotnie mniejszych niż występujące przy $c_p = 1,0 \text{ g/l}$. Zgodnie z rys. 6 – stężenie cząstek pierwotnych jest wystarczająco wysokie, by wystąpiły obserwowalne lokalne różnice w rozkładach wielkości flokuł. Oznacza to, że wzajemne oddziaływanie i kinetyka przynosi wcześniejsze efekty, niż oddziaływanie mechanizmów konwekcji – prowadzących do wyrównania lokalnych różnic w rozkładach wielkości flokuł.



Rys. 6. Obliczone i zmierzone w stanie ustalonym rozkłady wielkości flokuł w elementach 1 i 18 przy $Re = 10^4$ oraz $c_p = 0.5$ i 1,0 g/l. Linie – obliczenia symulacyjne, symbole – pomiary

Podsumowanie

Przeprowadzone badania oraz ich wyniki potwierdziły zadowalające odwzorowanie wielkości flokuł przez równania modelowe. Dotyczy to stanu ustalonego w zakresie liczb *Reynoldsa* $Re = 10^4 \div 2,0.10^4$; po przekroczeniu tej granicy zaobserwowano rozbieżności wyników obliczeń i eksperymentu.

LITERATURA

- [1] M. Dyląg, J. Rosiński, J. Kamieński: Czasopismo Techniczne 105, 5-M, 89, (2008).
- [2] M. Dyląg, J. Rosiński, J. Kamieński: Czasopismo Techniczne 105, 9-M, 3, (2008).
- [3] M. Dyląg, J. Kamieński, J. Rosiński: Inż. Ap. Chem. 49, nr 2, 35 (2010).
- [4] L. L. Schramm: Emulsions, Foams and Suspensions, Wiley-VCH, Weinheim 2005.