MATEUSZ KORPYŚ, ANNA GANCARCZYK, MARZENA IWANISZYN, KATARZYNA Sindera, Tadeusz Kleszcz, Andrzej Kołodziej

OPTYMALIZACJA ARANŻACJI STRUKTUR KRÓTKOKANAŁOWYCH STANOWIĄCYCH WYPEŁNIENIE REAKTORA KATALITYCZNEGO

Instytut Inżynierii Chemicznej Polskiej Akademii Nauk, ul. Bałtycka 5, 44-100 Gliwice

Krótkokanałowe wypełnienia strukturalne reaktorów chemicznych pracujących w reżimie przepływu laminarnego, w celu intensyfikacji procesów transportowych, powinny charakteryzować się rozwijającym profilem prędkości w kolejnych sekcjach. W pracy omówiono wyniki obliczeń numerycznych dotyczących zmiany profilu prędkości płynu w zależności od szerokości szczeliny między kolejnymi strukturami. Wykazano, iż dla danych warunków przepływu istnieje optymalna szerokość szczeliny.

Słowa kluczowe: struktury krótkokanałowe; profil prędkości

In order to intensify transport processes, short-channel structural fillings of chemical reactors operating in the laminar flow regime should be characterized by a developing velocity profile in the subsequent sections. The paper discusses the results of numerical calculations concerning the change of the fluid velocity profile depending on the gap width between these structures. It has been shown that for given flow conditions there is an optimal gap width.

Keywords: short-channel structures; velocity profile

1. WPROWADZENIE

Reaktory chemiczne z katalizatorami naniesionym na wypełnienia strukturalne o starannie dobranej geometrii znajdują zastosowanie w wielu procesach, w szczególności tam, gdzie wymagane są niewielkie opory przepływu, intensywny transport ciepła i masy wymuszony szybką reakcją chemiczną oraz znaczna powierzchnia kontaktu faz. Wymienić tu można procesy katalityczne ochrony środowiska takie, jak katalityczne dopalanie lotnych związków organicznych, tlenku węgla czy metanu [1–4]. Są to procesy o dużej skali i wielkim znaczeniu środowiskowym. Każde zmniejszenie zużycia energii, katalizatorów, redukcja wymiarów aparatury czy zwiększenie konwersji daje wymierne korzyści finansowe. Jednak często intensywność procesów transportu ciepła i masy jest zbyt mała w stosunku do szybkości reakcji katalitycznej; powoduje to ograniczenie ogólnej szybkości procesu do wartości otrzymywanych w procesach transportu masy. Dla danej szybkości reakcji, stosując wypełnienie w postaci struktur krótkokanałowych, można tak zaprojektować reaktor, aby nie ograniczać wydajności procesu, możliwej do osiągnięcia z punktu widzenia reakcji chemicznej. Poznanie zjawisk zachodzących w takich strukturach umożliwi istotny postęp w projektowaniu reaktorów katalitycznych.

Prowadzone dotychczas prace badawcze na temat struktur krótkokanałowych obejmują badania doświadczalne i modelowanie struktur pod kątem współczynników transportu ciepła i masy oraz oporów przepływu [5–9]. Istotnym zagadnieniem, rzadko poruszanym w literaturze, jest problem odległości pomiędzy kolejnymi strukturami oraz ich wzajemne usytuowanie. Aranżacja struktur, czyli ich wzajemne ustawienie, może intensyfikować lub osłabiać transport ciepła i masy oraz wpływać na opory przepływu przez reaktor. Jest to istotne zagadnienie projektowe.

Dlatego celem niniejszej pracy jest określenie optymalnego ułożenia struktur krótkokanałowych, stanowiących wypełnienie reaktora katalitycznego dla intensywnych procesów transportu ciepła i masy. Kształt profilu prędkości na wlocie do kanału wpływa istotnie na intensywność procesów transportu pędu, ciepła i masy, a zatem na funkcjonowanie reaktora [10–13]. Profil prędkości płynu formujący się w kanale posiada cechy rozwijającego się przepływu laminarnego. Po opuszczeniu kanału profile łączą się i dążą do profilu charakterystycznego dla całego reaktora o średnicy wielokrotnie większej, niż średnica pojedynczego kanału. Określenie odległości pomiędzy kolejnymi strukturami, na której uzyskuje się połączenie profili prędkości uformowanych w ich kanałach, zapewnia uzyskanie maksymalnych współczynników transportowych w kolejnych segmentach wypełnienia reaktora.

2. METODA OBLICZEŃ

Do modelowania analizowanego przypadku wykorzystano techniki numeryczne. Metody CFD (Computational Fluid Dynamics) pozwalają na numeryczne rozwiązanie układu równań różniczkowych opisujących przepływ płynów, wymianę ciepła i masy oraz innych powiązanych z nimi zjawisk. Obecnie metody numeryczne obok podejścia doświadczalnego i teoretycznego stanowią jeden z kluczowych etapów projektowania. Niewątpliwą zaletą modelu numerycznego odwzorowującego rzeczywistość jest łatwość odczytu takich parametrów i w takich obszarach aparatu, w których pomiar doświadczalny jest bardzo trudnym lub wręcz niemożliwym przedsięwzięciem.

W badanym układzie rozważany jest trójwymiarowy przepływ płynu. Na rys. 1 przedstawiono geometrię badanego wypełnienia oraz warunki brzegowe i początkowe zastosowane w obliczeniach.



Rys. 1. Wymiary struktury i domena obliczeniowa. Fig. 1. Structure dimensions and computational domain.

Analizie poddano strukturę składającą się z dziewięciu kanałów kwadratowych o średnicy wewnętrznej 3,37 mm każdy. Grubość ścianek kanału wynosiła 0,63 mm, a ich długość 3 mm. W symulacjach wykorzystano dwie struktury o identycznych wymiarach. Struktury zostały umieszczone współosiowo. Odległość pomiędzy strukturami wynosiła 0; 1; 3; 6 oraz 9,5 mm. Obliczenia wykonano dla prędkości płynu na wlocie wynoszącej 0,5; 1; 2 oraz 4 ms⁻¹.

2.1. SIATKA NUMERYCZNA

Do obliczeń wygenerowano siatkę numeryczną składającą się z elementów wielościennych (polyhedral mesh). Po wstępnej analizie do dalszych obliczeń wybrano siatki o liczbie elementów od 1,3 mln do 2,4 mln w zależności od odległości dzielącej badane struktury. Na rys. 2 przedstawiono przykładową siatkę zastosowaną do obliczeń.



Rys. 2. Siatka numeryczna. Fig. 2. Numerical grid.

Parametrem jakościowym, określającym, na ile wygenerowane elementy kształtem odpowiadają "komórce idealnej" czyli sześcianowi, jest parametr "orthogonal quality". Przyjmuje się, że wartość tego parametru powinna być większa od 0,1, natomiast komórki o wartości powyżej 0,7 są bardzo dobrej jakości. Wartość minimalna orthogonal quality w niniejszej pracy wynosiła od 0,2 do 0,4, natomiast wartość średnia – powyżej 0,7. Można zatem przyjąć, że wygenerowane siatki są bardzo dobrej jakości. Należy mieć na uwadze, że wyżej wymienione wartości parametrów określających jakość siatki odnoszą się do solwera Fluent, w przypadku innych kodów CFD konieczne może być spełnienie dodatkowych warunków jakościowych.

2.2. MODEL MATEMATYCZNY

Model CFD badanego przypadku oparty jest o uniwersalne równania zachowania masy,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho v) = 0 \tag{1}$$

oraz pędu

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p - (\nabla \cdot \tau) + \rho g \tag{2}$$

Obliczenia były prowadzone w stanie ustalonym, badanym płynem było powietrze traktowane jako gaz nieściśliwy o stałej wartości gęstości wynoszącej 1,225 kg·m⁻³ oraz stałym dynamicznym współczynniku lepkości 1,7894·10⁻⁵ Pa·s.

2.3. MODELOWANIE CFD

Do przeprowadzenia symulacji wykorzystano komercyjny pakiet CFD dostarczony przez firmę ANSYS, jako solwera użyto programu Fluent, działającego w oparciu o metodę objętości skończonych. W obliczeniach dla wszystkich równań wykorzystano dyskretyzację drugiego rzędu pod prąd. Do obliczeń gradientów wykorzystano metodę "Least-Squares Cell-Based" oraz standardowy algorytm sprzęgania ciśnienia z prędkością, SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) [14]. Pozostawiono domyślne wartości proponowane przez program dla współczynników relaksacji.

W modelowaniu wykorzystano warunek brzegowy stałej prędkości na wlocie oraz warunek "pressure-outlet" na wylocie (wymaga on określenia ciśnienia statycznego na wylocie i obowiązuje w zakresie przepływu poddźwiękowego, pozostałe parametry są ekstrapolowane na podstawie wartości z "wnętrza" domeny obliczeniowej). Kierunek przepływu płynu na wlocie zdefiniowano jako prostopadły do powierzchni wlotu, profil prędkości na wlocie był płaski. Na "ścianach" domeny obliczeniowej, z wyjątkiem struktur, zastosowano warunek symetrii, oznacza to, że w czasie przepływu płynu na takiej powierzchni nie występuje tarcie. Jedynymi obiektami powodującymi opory przepływu były analizowane struktury.

3. WYNIKI

Obliczenia przeprowadzono dla czterech szerokości szczeliny pomiędzy strukturami, było to odpowiednio 1; 3; 6 i 9,5 mm. Dodatkowo, wykonano obliczenia spadku ciśnienia dla zerowej odległości pomiędzy strukturami oraz dla odległości nieskończenie dużej (co odpowiada podwojonym oporom przepływu dla pojedynczej struktury o dł. 3mm). Na rys. 3 przedstawiono zestawienie spadków ciśnienia dla różnych układów struktur oraz czterech prędkości na wlocie do reaktora, było to odpowiednio 0,5; 1; 2 oraz 4 ms⁻¹. Otrzymane spadki ciśnienia mieszczą się pomiędzy wartościami granicznymi, tzn. najniższy możliwy spadek ciśnienia dla układu dwóch struktur jest możliwy w przypadku braku szczeliny pomiędzy nimi; najwyższy natomiast dla odległości nieskończenie dużej. W rozważanych przypadkach profil prędkości na wlocie do pierwszej struktury jest płaski.



Rys. 3. Spadek ciśnienia w analizowanym ułożeniu struktur. Fig. 3. Pressure drop in the analysed structure arrangement.

Z rys. 3 wynika, że spadki ciśnienia do prędkości ok. 2 ms⁻¹ na wlocie do reaktora są do siebie zbliżone i odstęp pomiędzy strukturami nie wnosi znacznego udziału do całkowitych oporów przepływu. Dla prędkości powyżej 2 ms⁻¹ i szerokości szczeliny powyżej 1 mm obserwuje się istotny wzrost oporów przepływu.

Na rys. 4 przedstawiono profile prędkości dla różnych szerokości szczelin pomiędzy strukturami otrzymane w wyniku obliczeń CFD. Prędkość na wlocie do reaktora wynosiła 1 m/s. Na rysunku bardzo dobrze widoczne są obszary stagnacji oraz obszary znacznego przyspieszenia przepływającego płynu.







Rys. 4. Wykresy konturowe prękości płynu dla różnych szerokości szczeliny pomiędzy struktutami. Fig. 4. Contour plots of fluid velocity for different widths of the gap between structures.

Na rys.5 przedstawiono profile prędkości w środkowej części szczeliny (w przekroju A-A, patrz rys. 4) pomiędzy strukturami (w zależności od prędkości na wlocie do reaktora. Długość oznaczona na osi odciętych jako, *l*, jest to wysokość analizowanego reaktora; na rys. 1 zaznaczono zielonym kolorem linię z opisem "profil prędkości" - jest to linia (12,63 mm), na długości której w różnych przekrojach reaktora odczytano profile prędkości i zaprezentowano na poniższych rysunkach. Profile prędkości odnoszą się do przekroju w jej środku, będzie to odpowiednio 0,5; 1,5; 3 oraz 4,75 mm.



Rys. 5. Zmiana profilu prędkości w środkowej części szczelin w zależności od szerokości szczelin pomiędzy strukturami dla różnych prędkości włotowych gazu.

Fig. 5. Change of the velocity profile in the middle of the gaps depending on the width of the gaps between the structures for different gas inlet velocities.

Z rys. 5 wynika, że prędkość przepływu płynu po opuszczeniu struktury w obszarach odpowiadających grubości ścianki struktury jest bliska zeru, jest to widoczne zwłaszcza dla szczeliny o grubości 1 mm. W przypadku szczelin o większych szerokościach widoczne jest formowanie się parabolicznego profilu prędkości.

Na uwagę zasługuje również przyjrzenie się zmianie profilu prędkości wzdłuż kierunku przepływu w szczelinie pomiędzy strukturami, jak również za drugą strukturą. Na rys. 6 przedstawiono zmianę profilu prędkości dla szerokości szczeliny wynoszącej 6 mm oraz prędkości na wlocie 1 ms⁻¹. Profil prędkości został oznaczony w sześciu przekrojach zgodnych z kierunkiem przepływu, z krokiem 1 mm zaczynając od przekroju usytuowanego w odległości 0,5 mm za pierwszą strukturą. W legendzie rysunku wyróżniono odległości przekrojów.



Rys. 6. Zmiana profili prędkości w przekrojach szczeliny między strukturami oddalonymi od siebie o 6 mm, prędkość na wlocie 1 ms⁻¹.

Fig. 6. Change of velocity profiles in cross-sections of the gap between structures spaced 6 mm apart, inlet velocity 1 ms⁻¹.

Z rys. 6 wynika, że obszar stagnacji obserwowany w okolicy ścianek struktury zanika w odległości ok. 1,5 mm. Z rysunku widać, że średnia prędkość w szczelinie nie ulega znacznym zmianom. Modyfikacje kształtu profilu prędkości dotyczą głównie obszarów związanych ze ścianami struktury, na osi odciętych jest to zakres 0–0,63; 4–4,63; 8–8,63 oraz 12–12,63 mm.

Na rys. 7 przedstawiono, analogicznie jak powyżej, zmiany profili prędkości dla tego samego przypadku z tym, że dotyczą przekrojów za drugą strukturą.



Rys. 7. Zmiana profili prędkości w zależności od odległości (z) za drugą strukturą. Struktury oddalone od siebie o 6 mm, prędkość na wlocie 1 ms⁻¹.

Fig. 7. Changing the velocity profiles depending on the distance (z) behind the second structure. Distance between structures 6mm, inlet velocity 1ms⁻¹. Z rys. 7 wynika, że istotna zmiana profilu prędkości, polegająca na jego "wypłaszczeniu" następuje w odległości ok. 23 mm za strukturą. Jeśli istotne "wypłaszczenie" profilu prędkości następuje na tej odległości, oznacza to, że jest to minimalna szerokość szczeliny, jaka powinna być zastosowana pomiędzy strukturami w celu maksymalizacji korzyści wynikających z rozwijającego się profilu prędkości płynu w kolejnej strukturze. Szerokość 23 mm dotyczy tylko omawianego przypadku tj. grubość struktury 3 mm i prędkość powietrza na włocie do reaktora 1 ms⁻¹.

Rys. 8 przedstawia uśrednione wartości prędkości w poszczególnych przekrojach.



Rys. 8. Średnia prędkość płynu w kolejnych przekrojach szczeliny między strukturami oraz za drugą strukturą. Odległość miedzy strukturami 6 mm, predkość na wlocie 1 ms⁻¹.

Fig. 8. Average fluid velocity in successive cross sections of the gap between the structures and behind the second structure. Distance between structures 6 mm, inlet velocity 1 ms⁻¹.

Z rys. 8. wynika, że średnia wartość prędkości za drugą strukturą w stosunku do prędkości w analogicznych odstępach za pierwszą strukturą jest nieco większa. Potwierdza to, że profil prędkości na wlocie do drugiej struktury jest inny, niż do pierwszej (płaski profil prędkości). Z powyższego rysunku, podobnie jak z rys. 7, można odczytać, że profil prędkości płynu ulega znaczącemu ujednorodnieniu w odległości ok. 23 mm za drugą strukturą.

Na rys. 9 przedstawiono zestawienie średnich prędkości w kolejnych przekrojach za drugą strukturą dla założonych prędkości wlotowych płynu. Z rysunku wynika, że prędkość początkowa nie ma istotnego wpływu na odległość, na której następuje "wypłaszczenie" profilu prędkości. Dla wszystkich analizowanych prędkości jest to odległość ok. 23 mm.



Rys. 9. Średnia prędkość płynu w kolejnych przekrojach dla różnych prędkości początkowych. Struktury oddalone od siebie o 6 mm.



WNIOSKI

- Optymalna szerokość szczeliny pomiędzy kolejnymi elementami wypełnienia może zostać określona na podstawie obliczeń CFD. Dodatkowo, dzięki wynikom z obliczeń można uzyskać informacje o kształcie profilu prędkości płynu w różnych przekrojach reaktora.
- Prędkość początkowa nie ma istotnego wpływu na odległość, na której dochodzi do łączenia się profili prędkości opuszczających kanały struktury. W analizowanym przypadku struktury o kwadratowym kształcie kanałów odległość, na której obserwuje się ujednorodnienie profilu prędkości wynosi ok. 23 mm.
- Dla prędkości płynu wynoszącej do ok. 2 ms⁻¹ nie obserwuje się wpływu odstępu pomiędzy kolejnymi strukturami na wartość oporów przepływu, powyżej tej prędkości opory przepływu rosną ze wzrostem szczeliny pomiędzy elementami wypełnienia.

PIŚMIENNICTWO CYTOWANE - REFERENCES

- A. Kołodziej, J. Łojewska, Short-channel structured reactor for catalytic combustion: Design and evaluation, Chem. Eng. Process. Process Intensif. 46 (2007) 637–648. https://doi.org/10.1016/j.cep.2006.08.009.
- [2] A. Kołodziej, J. Łojewska, J. Ochońska, T. Łojewski, Short-channel structured reactor: Experiments versus previous theoretical design, Chem. Eng. Process. Process Intensif. 50 (2011) 869–876. https://doi.org/10.1016/j.cep.2011.05.003.

- [3] A. Kołodziej, J. Łojewska, J. Tyczkowski, P. Jodłowski, W. Redzynia, M. Iwaniszyn, S. Zapotoczny, P. Kuśtrowski, Coupled engineering and chemical approach to the design of a catalytic structured reactor for combustion of VOCs: Cobalt oxide catalyst on knitted wire gauzes, Chem. Eng. J. 200–202 (2012) 329–337. https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.06.067.
- [4] A. Gancarczyk, K. Sindera, M. Iwaniszyn, M. Piątek, W. Macek, P.J. Jodłowski, S. Wroński, M. Sitarz, J. Łojewska, A. Kołodziej, Metal Foams as Novel Catalyst Support in Environmental Processes, Catalysts. 9 (2019) 587. https://doi.org/10.3390/catal9070587.
- [5] A. Gancarczyk, M. Iwaniszyn, M. Piątek, K. Sindera, M. Korpyś, P.J. Jodłowski, J. Łojewska, A. Kołodziej, Interfacial heat and momentum transfer relation for porous media, Int. J. Therm. Sci. 132 (2018) 42–51. https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2018.04.028.
- [6] A. Kołodziej, M. Jaroszyński, B. Janus, T. Kleszcz, J. Łojewska, T. Łojewski, An experimental study of the pressure drop in fluid flows through wire gauzes, Chem. Eng. Commun. 196 (2009) 932–949. https://doi.org/10.1080/00986440902743851.
- [7] A. Kołodziej, J. Łojewska, Mass transfer for woven and knitted wire gauze substrates: Experiments and modelling, Catal. Today. 147 (2009) S120–S124. https://doi.org/10.1016/j.cattod.2009.07.038.
- [8] A. Gancarczyk, M. Iwaniszyn, M. Piątek, M. Korpyś, K. Sindera, P.J. Jodłowski, J. Łojewska, A. Kołodziej, Catalytic Combustion of Low-Concentration Methane on Structured Catalyst Supports, Ind. Eng. Chem. Res. 57 (2018) 10281–10291. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b01987.
- [9] A. Gancarczyk, M. Piątek, M. Iwaniszyn, P. Jodłowski, J. Łojewska, J. Kowalska, A. Kołodziej, In Search of Governing Gas Flow Mechanism through Metal Solid Foams, Catalysts. 7 (2017) 124. https://doi.org/10.3390/catal7040124.
- [10] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, Transport phenomena, 2nd ed., Wiley, New York, 2007.
- [11] R.A. Granger, Fluid Mechanics, 1st ed., Dover Publications, New York, 1995.
- [12] H. Schlichting, K. Gersten, Boundary-Layer Theory, 9th ed., Springer, Berlin, Heidelberg, 2017. https://doi.org/10.1007/978-3-662-52919-5.
- [13] R.K. Shah, A.L. London, Laminar Flow Forced Convection in Ducts, 1st ed., Academic Press, New York, 1978.
- [14] S. V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, CRC Press, 1980.

OPTIMIZATION OF THE ARRANGEMENT OF SHORT-CHANNEL STRUCTURES CONSTITUTING THE FILLING OF THE CATALYTIC REACTOR

Chemical reactors with catalysts applied to structural packing with carefully selected geometry are used in many processes, in particular where low flow resistance, intensive heat and mass transport forced by a rapid chemical reaction and a large contact surface area are required.

Each reduction in the consumption of energy, catalysts, apparatus dimensions or increase in conversion gives measurable financial benefits. However, often the intensity of the heat and mass transport processes is too low in relation to the rate of the catalytic reaction; this limits the overall rate of the process to the value allowed by mass transport. Short-channel structures make it possible to design the reactor for a known reaction rate in such a way as not to limit the efficiency of the process, achievable from the point of view of the chemical reaction. Understanding the phenomena occurring in such structures will enable significant progress in the design of catalytic reactors.

The aim of this study is to determine the optimal arrangement of short-channel structures for a catalytic reactor characterized by intensive heat and mass transport processes. The shape of the velocity profile at the inlet to the channel significantly affects the intensity of heat and mass transport, and thus the reactor work conditions. The fluid velocity profile that forms in the channel has the characteristics of a developing laminar flow. Determining the distance between successive structures, at which the connection of the velocity profiles formed in their channels is obtained, ensures the achievement of maximum transport coefficients in the successive segments of the reactor filling.

Numerical techniques were used to model the analysed case. CFD (Computational Fluid Dynamics) methods allow for numerical solution of a system of differential equations describing fluid flow, heat and mass transfer and other related phenomena.

The structure consisting of nine square channels with an internal diameter of 3,37 mm each was analysed. The channel walls were 0,63 mm thick and 3 mm long. Two structures with identical dimensions were used in the simulations. The structures were placed coaxially. The distance between the structures was 0; 1; 3; 6 and 9,5 mm. The calculations were made for the inlet fluid velocity of 0,5; 1; 2 and 4 ms⁻¹.

As a result of the calculations and analysis, it was found that:

- optimal width of the gap between successive filling elements can be determined on the basis of CFD calculations. Additionally, thanks to the results of the calculations, it is possible to obtain information on the shape of the fluid velocity profile in various sections of the reactor;

- initial velocity does not significantly affect the distance at which the velocity profiles exiting the channels of the structure connect. In the analysed case of a structure with a square shape of channels, the distance at which uniform velocity profile is observed is approx. 23 mm;

- for a fluid velocity of up to approx. 2 ms⁻¹, no effect of the interval between successive structures on the value of flow resistance is observed, above this velocity, the flow resistance increases significantly with the increase of the gap between the filling elements.

Received: 16.11.2020 Accepted: 01.12.2020