

CFD АНАЛИЗ НА НЯКОИ ХИДРОДИНАМИЧНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ В РЕАКТОР С РАЗБЪРКВАНЕ ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА НАНО-РАЗМЕРНИ МАТЕРИАЛИ

Добрин Георгиев, Диян Радев, Живко Иванов

Университет „Проф. д-р Асен Златаров“, Факултет по технически науки, катедра „Химично инженерство“, 8000, гр. Бургас, *dpg@abv.bg*

CFD ANALYSIS OF SOME HYDRODYNAMIC CHARACTERISTICS IN A STIRRED REACTOR FOR NANO-SIZED MATERIALS OBTAINING

Dobrin Georgiev, Dian Radev, Zhivko Ivanov

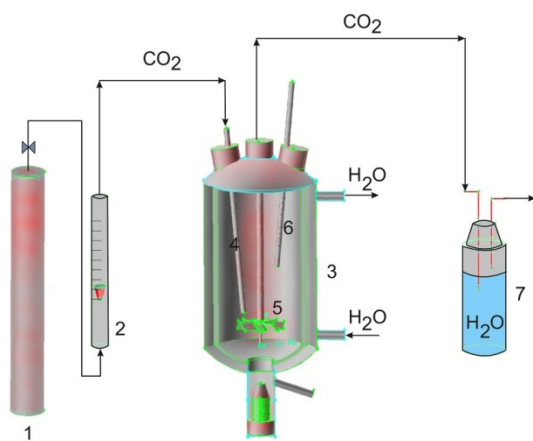
ABSTRACT

Based on the CFD methodology, the study aims local analysis of some reactor performance characteristics in complex-hydrodynamic multiphase system. A 3D geometric model of a real laboratory reactor with axial mixing impeller is built in order to cover a computational grid of cells. A mathematical background of RANS equations, RSM turbulent model and Eulerian multiphase model are taken into account to reveal the flow fields and volume fraction distribution. The angle-average and local velocity magnitudes, and strain rates of multiphase system are revealed. The computational data is analyzed and considered in order to optimize the conditions for obtaining of nano-structure carbonate materials by micro-emulsion technique led by forced mixing and bubbling.

Keywords: CFD, mixing tank, nanotechnology, flow fields, strain rates.

ВЪВЕДЕНИЕ

Методите за получаване на наноструктури в последните десетилетия бележи значителен възход, поради все по-широкия диапазон на приложимост на наноразмерни материали в редица области от практиката. Чувствителността на наноформирането от работните условия е все още обект на научен интерес, поради сложния и комплексен характер между физико-химичните и хидродинамични предпоставки, водещи до качествена нанопродукция в необходимото количество. В настоящата работа е използван съвременен CFD подход при опита за разкриване на хидродинамичната картина в анализиран вече обект [1] за синтез на наноструктури на BaCO_3 в микроемулсионна система посредством механично разбъркване на регентите и газово подаване на CO_2 (фиг.1). Проведеното до момента качествено и количествено охарактеризиране на процеса включва предимно интегрални характеристики на анализирания обект, системно изследване на реакционните условия посредством пълен многофакторен експеримент на две нива, както и някои локални оценки по отношение на структурата на продукцията, направени с метода на трансмисионната електронна микроскопия [2]. В следствие бе закупен нов реакционен съд SCHMIZO с по-големи размери и автоматизиран разбъркващ елемент с вал и електромотор. Това наложи нуждата от нови детайлни изследвания върху хидродинамичната картина на трифазната система (воден разтвор – органична фаза – газ) на локално ниво в определени области от реакционния обем. Особен интерес представляват генерираните от разбъркващото устройство скорости на тангенциална деформация на флуида (скорости на срязване), поради ключовата им роля за разбиване на емулсионните капки до наноразмери и протичащата в тях в следствие химична реакция [3]. В съвременен план подобен анализ би бил удачен с използването на Лазер-Доплер анемометрия, която за съжаление изисква скъпо апаратурно обезпечение. Поради тази причина удобно, бързо и надеждно достигане до нужните локални хидродинамични характеристики се явява методът „Изчислителна механика на флуиди“ (CFD), който беше предпочетен, като основен в настоящото изследване. За целта анализираният обект бе представен, като виртуален геометричен модел

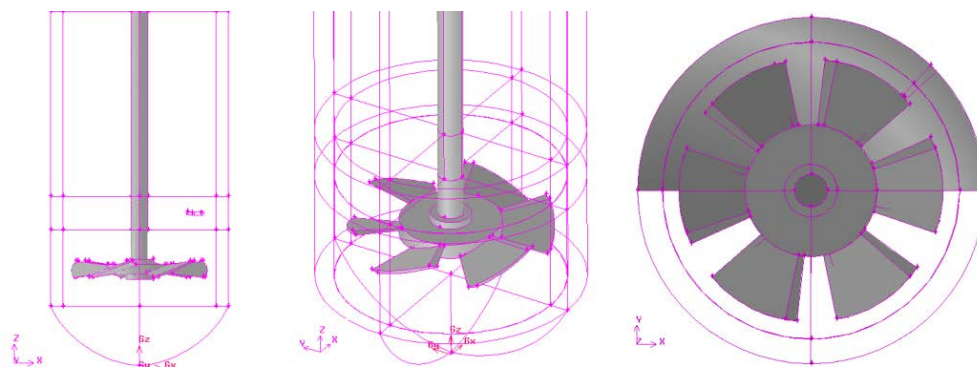


от изчислителна мрежа, за която итеративно при зададени гранични условия бяха решени диференциалните уравнения на движение, дефинирани за мултифазна среда с помощта на Ойлеровия подход.

Фиг. 1 Лабораторна постановка на реактор с разбъркване за синтезиране на наноразмерни частици от BaCO_3 : 1 – газова бутилка за CO_2 , 2 – рораметър, 3 – реакционен стъклен съд SCHMIZO, 4 – стъклен газоразпределител, 5 – разбъркващо устройство, 6 – термометър, 7 – дрексел

ИЗЧИСЛИТЕЛНА ПРОЦЕДУРА

През последните години, наред с познатите физични методи за охарактеризиране на динамиката в подвижни среди, методът „Изчислителна механика на флуиди“ (CFD) се очертава, като надежден и мощен инструмент в етапите на инженерното проектиране и оптимизация. Именно поради предоставените от него възможности за локални изследвания върху условията в сложни многофазни системи при комплексни хидродинамични условия, CFD бе предпочетен като основен метод в настоящия анализ. За целта реалният изследван обект бе представен, като компютърен геометричен модел (фиг.2), върху който бе изградена изчислителна мрежа от $4 \cdot 10^5$ пространствени клетки с правоъгълни и триъгълни стени. Познавайки се на литературни данни [4], за динамичната симулация на система с разбъркване бе използван способът „плъзгаща мрежа“ (Sliding mesh), при който разбърквания флуид се разделя на две зони – цилиндрична зона в областта на разбърквания елемент и зона в останалата част на реакционния обем. На границата между двете зони бяха дефинирани цилиндрични повърхнини (interfaces), които се „приплъзват“ една спрямо друга на всяка итеративна стъпка. Алтернативната процедура „мултиреферентна рамка“ (MRF) [5], бе използвана само за стационарното симулиране на хидродинамичните условия.



Фиг. 2 Геометричен модел на реакционния обем и разбъркващото устройство

Реакционната среда, която представлява сложна трифазна система от неорганичен разтвор на бариев хидроксид, органична течна фаза и газообразна фаза от въглероден диоксид, бе представена като двуфазна система от течна фаза с усреднени за двете течности физикохимични свойства (816 kg/m^3 , $0,47 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}$) в която точково се подава газообразна фаза ($1,79 \text{ kg/m}^3$, $1,37 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$) с постоянна скорост 3 m/s . Балансовите уравнения за всяка изчислителна клетка включват: законът за запазване на масата (уравнение на непрекъснатост), законът за запазване на импулса (уравнения на Навие-Стокс) и уравнение на състоянието (за газовата фаза). Мултифазната система е симулирана с помощта на Ойлер-

Ойлер мултифазен модел [6], при който импулсите и непрекъснатостта се изчисляват за всяка фаза поотделно, като се отчита и контакта между тях. Всяка фаза се изразява, чрез обемна част α_q (обемът на q -тата фаза в изчислителната клетка към пълния обем на клетката). Така обемът на фазата ще се удовлетвори от условието:

$$V_q = \int_V \alpha_q dV; \quad \sum_{q=1}^n \alpha_q = 1$$

По този начин уравнението на непрекъснатостта, изразено за всяка фаза ще придобие вида:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \vec{w}_q) = \frac{1}{\rho_q} \sum_{p=1}^n \dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}$$

Векторът \vec{w}_q характеризира локалната скоростта на фаза q , \dot{m}_{pq} изразява масообмена от фаза p към фаза q , а \dot{m}_{qp} – от q към p . Аналогично законът за запазване на импулса ще има следната форма:

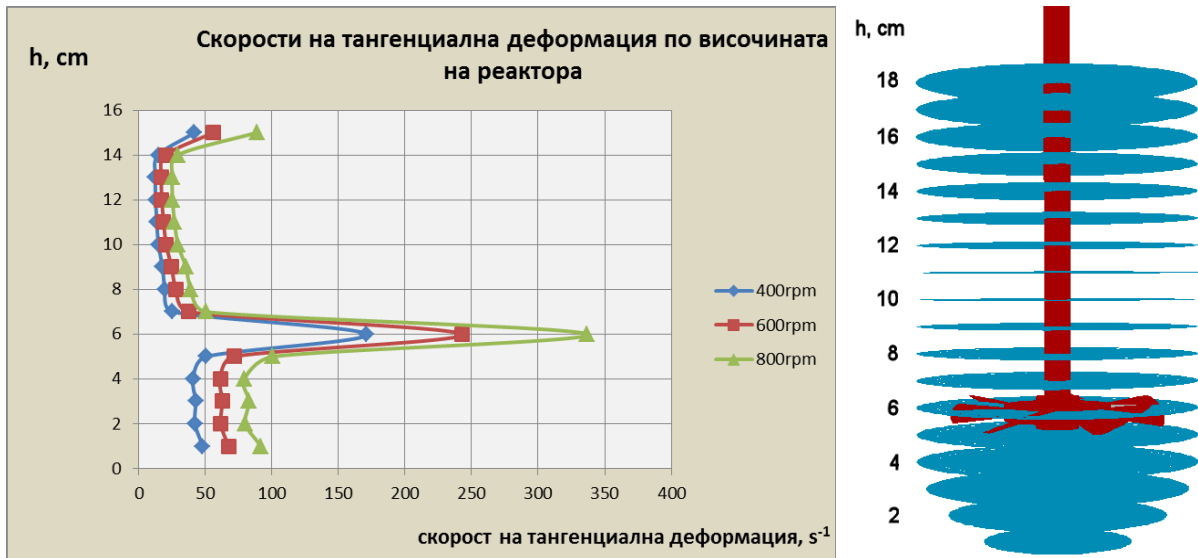
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{w}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{w}_q \vec{w}_q) = \\ = -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{r}}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \\ + \sum_{p=1}^n [K_{pq}(\vec{w}_p - \vec{w}_q) + \dot{m}_{pq} \vec{w}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{w}_{qp}] + F_{sum} \end{aligned}$$

В горния израз \vec{g} изразява ускорението в следствие на гравитация, $\bar{\bar{r}}_q$ – тензора на напрежение на q -тата фаза, $K_{pq} = K_{qp}$ има смисъл на междуфазен обменен коефициент по отношение на импулса, функция от времето на пребиваване, F_{sum} обобщава всички останали сили, вкл. подемна сила, тегло на изчислителната клетка и др. \vec{w}_{pq} и \vec{w}_{qp} са както следва: ако $\dot{m}_{pq} > 0$, (масата се пренася от фаза p към q), то $\vec{w}_{pq} = \vec{w}_p$. Ако $\dot{m}_{pq} < 0$ (обменът на маса е в посока от q към p), то $\vec{w}_{pq} = \vec{w}_q$. Аналогично: $\vec{w}_{qp} = \vec{w}_q$, ако $\dot{m}_{qp} > 0$ и $\vec{w}_{qp} = \vec{w}_p$, ако $\dot{m}_{qp} < 0$

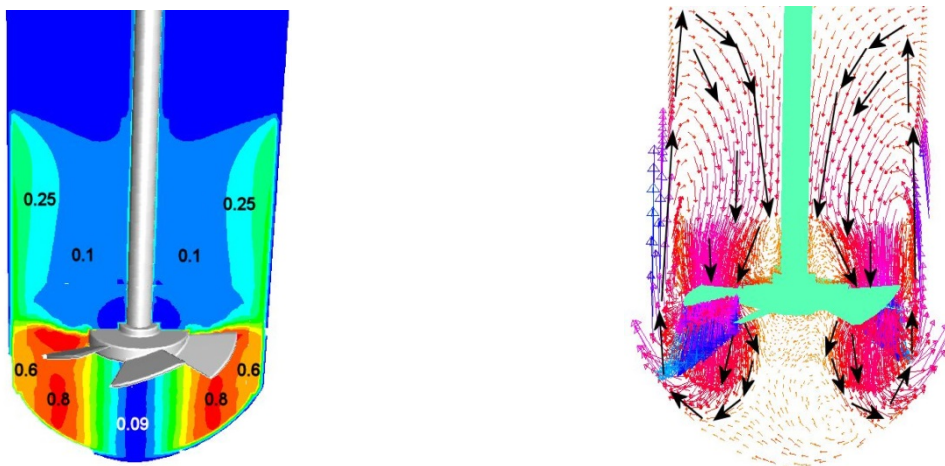
РЕЗУЛТАТИ И ОБСЪЖДАНЕ

Достигнатите резултати обхващат два типа симулационни експеримента: при стационарни условия (unsteady) и динамични условия (като функция от времето). Стационарните числени експерименти са проведени за три скорости на въртене на разбъркващото устройство, съответно 400, 600 и 800 грм. Динамичният експеримент проследява разпределението на газовата фаза в течната среда при 400 грм (по аналогия на реално проведен лабораторен експеримент). Известно е, че при получаването на наноразмерни материали посредством микроемулсионната техника, получените структури от наночастици се формират в емулсионните капчици, които трябва да бъдат максимално фино диспергирани в дисперсната среда. От реологична гледна точка, основният хидродинамичен показател, който влияе на степента на диспергиране на органичната фаза във водния разтвор е скоростта на тангенциална деформация на мултифазната система. На фиг.3 са представени стойностите на ъглово-усреднените скорости на тангенциална деформация (скорости на срязване, $\gamma [s^{-1}]$) по височината на реакционния обем. Стойностите са ъглово усреднени за множество хоризонтални повърхнини, минаващи на всеки 1cm от височината на реактора, а самата скорост на деформация е пресметната, като втора инварианта от стрес-тензора. Очаквано, скоростите в близост до бъркачката имат стойности с порядък по-големи от тези в останалата част на разбърквания обем. За трите скорости на разбъркване, γ се покачва почти линейно. Подобна тенденция се наблюдава и в зоната под разбъркващото устройство, където

стойностите варират от 40s^{-1} до 80s^{-1} . В горната част от обема обаче, която представлява повече от 60% от общия обем, диапазонът в който скоростта на срязване варира е в порядъка от 15s^{-1} до 30s^{-1} . Този факт може да се отчете като сериозен недостатък и би могъл да послужи, като предпоставка за обмисляне на друг тип разбъркващо устройство, обезпечаващо по-висока стойност на деформацията на флуида в зоната над разбъркващото устройство (например турбина тип „Rushton“).

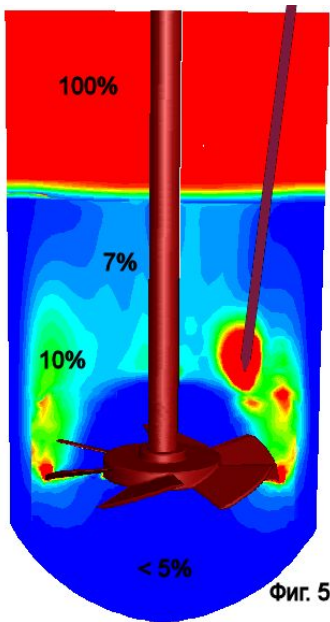


Фиг.3 Ъглово-усреднени скорости на тангенциална деформация (скорости на срязване) по височината на реактора.



Фиг. 4 Локални линейни скорости – контурна и векторна диаграма, m/s.

На фиг. 4 са демонстрирани разпределенията на локалните скорости за централно вертикално сечение на реакционния обем във вид на контурни повърхнини и скоростни вектори. Прави впечатление широката област с не големи линейни скорости на флуида ($0,1\text{m/s}$), която заема около $2/3$ от съда в областта над разбъркващото устройство. Демонстрираното поведение на изразено аксиално изпомпване на потоците в низходяща посока, за сметка на по-слабата циркулация в областта над бъркачката, би могла да се избегне с инсталирането на турбина, генерираща радиално разпределение на потоците, при централно разполагане в реактора. Разпределението на газовата фаза (CO_2), която се подава със скорост 3 m/s с помощта на стъклена газоразпределителна тръба, разположена на 2 cm



над разбъркващото устройство в близост до корпуса на реактора е демонстрирана на фиг.5. Резултатите отговарят за симулационно време, равно на времето на хомогенизация за този тип разбъркващо устройство. Максималното газосъдържание в разбърквания обем извън зоната на подаване не надхвърля 10% при 400rpm.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощта на съвременен изчислително-симулационен метод (CFD) е достигнато до информация върху базови хидродинамични характеристики в реакционен съд за синтез на нанопластици. Намерени са ъглово-усреднените линейни скорости по височина на реактора и разпределението на локалните линейни скорости за три оборота на въртене. Установени са скоростите на тангенциална деформация (скорост на срязване) в разбърквания флуид за конкретния тип разбъркващо устройство. Отчетено е недостатъчното завишаване на скоростта на срязване с увеличаването на оборотите, което предполага известно губене на ефективност от разбъркването, дори и при увеличаване на ъгловата скорост. Резултатите биха послужили, като база за обмисляне внедряването на друг тип разбъркващо устройство, генериращо по-„агресивна“ тангенциална деформация, което би довело до по-голямо количество продукция от наноразмерен бариев карбонат.

ИЗПОЛЗВАНА ЛИТЕРАТУРА

1. Славова А, Х. Карагъзов, Б. Богданов, Й. Динев, 2006. Системно изследване на ролята на реакционните условия при синтеза на наночастици от BaCO_3 посредством пълен факторен експеримент, Наука в условията на глобализация през XXI век, Том III, 370-375
2. Georgieva A., Ch. Karagiozov, J. Ulrich, B. Bogdanov, Y. Denev, 2010. Nano-sized BaCO_3 particles – a study the effects of the physico-chemical conditions on the synthesis in a water in oil microemulsion systems, Asian Chemistry Letters, Vol.14 (2), 141-148
3. Karamipour S, H. Ebadi-Dehaghani, D. Ashouri, S. Mousavian, 2011. Effect of nano- CaCO_3 on rheological and dynamic mechanical properties of polypropylene: Experiments and models, Polymer Testing, Vol. 30 (1), 110–117
4. Si Huang, A.A. Mohamad, K. Nandakumar, Z.Y. Ruan, D.K. Sang, 2010. Numerical simulation of unsteady flow in a multistage centrifugal pump using sliding mesh technique, Progress in Computational Fluid Dynamics, vol.10 (4), 239-245
5. Patel Haresh, Farhad Ein-Mozaffari, Ramdhane Dhib, 2010. CFD analysis of mixing in thermal polymerization of styrene, Computers & Chemical Engineering, Volume 34, Issue 4, 421–429
6. Wang H, X. Jia, X. Wang, Z. Zhou, J. Wen, J. Zhang, 2014. CFD modeling of hydrodynamic characteristics of a gas–liquid two-phase stirred tank, Applied Mathematical Modelling, Vol.38 (1), 63–92

Настоящото изследване е финансирано от Научно-изследователски сектор, „Научна и художествено-творческа дейност“ при Университет „Проф. Д-р Асен Златаров“- гр. Бургас, Факултет по технически науки, с научноизследователски проект ДОГОВОР № НИХ – 286 и съдействието на ИИХ-БАН.