



**Országos Tudományos Diákköri
Konferencia
2013**



Üstreaktorok betáplálási helyeinek optimalizálása

Készítette: Molnár Bálint

Szak: Vegyészmérnök BSc.

Témavezető: Dr. Chován Tibor, Egyetemi docens

Dr. Varga Tamás,

Egedy Attila

Mérnöki kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

Pannon Egyetem

Absztrakt

A reaktorok modellezése az iparban a tervezés, a kutatás-fejlesztés és az üzemeltetés során is nagy szerepet kap. E feladatokra alkalmas matematikai összefüggések, és numerikus megoldó módszerek már több mint fél évszázada a birtokunkban voltak ám csak az elmúlt években tapasztalt számítástechnika rohamos fejlődésének köszönhetően tudták ezeket a bonyolult számításokat elvégezni, még hozzá olyan rövid idő alatt, hogy az gazdaságos legyen. A dolgozatban egy keverővel ellátott, folyamatos üstreaktornak a numerikus áramlástan (CFD – Computational Fluid Dynamics) módszereivel való beinjektálási helyének a meghatározása lesz.

Egy reaktor tervezésénél mindig ügyelni kell a benne lejátszódó folyamatokra (hőátadás, komponensátadás, reakció lejátszódása), az optimális üzemeltetési paraméterekre, megfelelő fázishomogenizálásra. A berendezések keveredési viszonyai, áramlási képei már alaposan fel lettek térképezve az elmúlt évek, évtizedek során, ám ha reakciót szeretnénk lejátszatni a berendezésben, akkor legalább ennyire fontos, hogy a komponensek megfelelően legyenek betáplálva, mert csak így biztosítható a kívánt konverzió elérése. A munka végére elsősorban egy olyan eszköz elkészítése a cél, amely egy a felhasználó által kiválasztott reakciórendszer esetén megmutatja, hogy egy keverővel ellátott, folyamatos üstreaktorban hova és hogyan érdemes beinjektálni a reagenseket, hogy a reaktor működését jellemző konverzió optimális legyen.

A vizsgált üstreaktor CFD modelljének implementálása COMSOL Multiphysics v4.2 szoftverrel történt. A dolgozatban a geometria részletes bemutatásáról, a reaktorban különböző geometriájú keverőelemek által kialakított áramlási képek vizsgálatáról, és a megfelelő konverzió eléréséhez az optimális betáplálási hely meghatározásáról lesz szó.

Tartalomjegyzék

Absztrakt.....	2
Tartalomjegyzék	4
1. Bevezetés	5
2. Az áramlástan kialakulása	6
2.1. A CFD alakulása.....	7
2.2. Példák az ipar területéről	9
2.2.1. Statikus keverő	10
2.2.2. Szuperkritikus folyadék szimuláció a kritikus ponton túl.....	11
2.2.3. Elfutási reakciók vizsgálata	11
2.2.4. Kémiai reakciók kevert tartályban.....	12
2.3. Keverés	13
2.4. COMSOL Multiphysics.....	15
3. A kevert berendezés CFD modelljének megalkotása	16
4. Eredmények	19
4.1. A lapátgeometriák vizsgálata.....	19
4.2. Betáplálási helyek vizsgálata	25
4.3. Injektálási helyek vizsgálata	30
4.4. A konverziók és a tartózkodási idők kapcsolata	35
5. Összefoglalás és konklúzió.....	38
6. Melléklet.....	39
7. Irodalomjegyzék	40
Köszönetnyilvánítás	41

1. Bevezetés

A vegyiparban az egyik leggyakrabban alkalmazott műveleti egységek a kevert berendezések, reaktorok. Többféleképpen osztályozhatók, a működés szerint (szakaszos, félfolyamatos, folyamatos), termikus működés alapján (izoterm, adiabatikus), vagy az alkalmazott keverőelem alapján (turbínakeverő, jet keverő, lapátkeverő stb.). A dolgozatban egy keverővel ellátott, folyamatos üstreaktor lesz a vizsgálat tárgya. Ez egy olyan tartály, amelybe folyamatosan lépnek be, illetve ki a reagáló anyagok, illetve a termékek, és a jobb elegyedés érdekében kevertetjük azokat.

Mivel ezek a berendezések legtöbbször egy működő technológia részei, ezért kísérleti információk nehezen szerezhetők be, illetve előfordulhat, hogy egy modell felépítéséhez szükséges adatok összegyűjtése hosszú időbe telik. Megoldást jelenthetnek a félüzemi kísérletek, de ezekben az esetekben a méretnövelés okozhat problémát, ugyanis ez jelentősen befolyásolhatja a berendezésben kialakítandó áramlási képet. A méretnöveléssel sok kutató foglalkozott már, és jelenleg külön tudományágként kezeljük. E tudományterület kialakulásakor még bonyolult módon, dimenziómentes számok útján történt a számítás, korunkban viszont már elterjedésüknek köszönhetően széles körben alkalmazható tervezőprogramok állnak rendelkezésre (pl. Aspen).

Ideális esetben a bevezetett folyadék összes részecskéje azonos – a tervezés során meghatározott – ideig tartózkodna a rendszerben. Ez természetesen a valóságban ritkán történik így, például ha pasztaszerű anyagokat lassan áramoltatunk egy csővezetékben, akkor a következő lesz megfigyelhető: lesznek olyan elemi térfogatok a betáplált áramban, melyek azonnal kilépnek a berendezésből, de lesznek olyanok, amelyek rövidebb-hosszabb időt eltöltenek a tartályban, és ezek között jelentős mértékű eltérés lehet. Ennek alapvető oka, hogy az átáramló közeg különböző térfogatelemei különböző útvonalakon, különböző sebességgel haladnak keresztül a reaktor egyes részein.

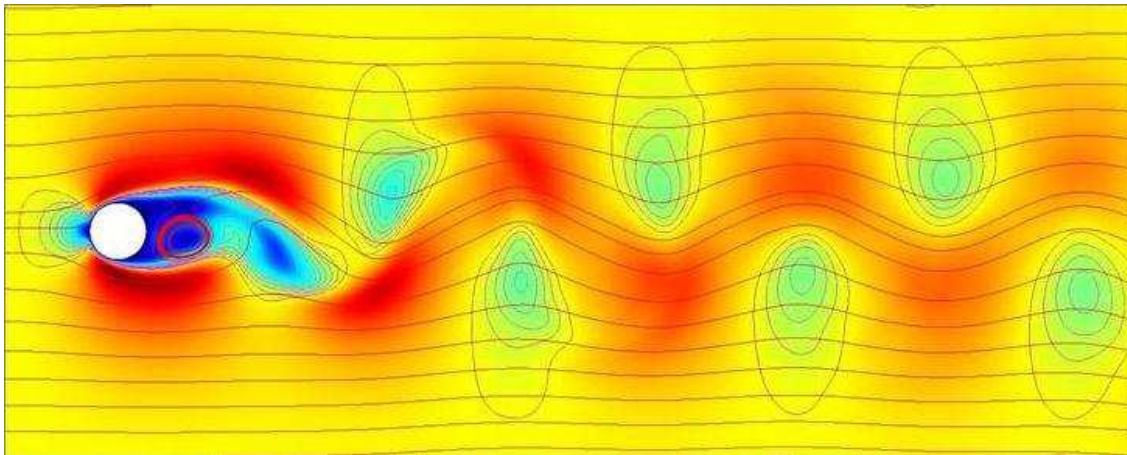
Annak érdekében, hogy ezt a sokoldalú berendezést vizsgálni tudjuk a technológia megbontása nélkül a numerikus áramlástani (Computational Fluid Dynamics - később már csak CFD) módszerek használata javallott. A CFD módszerek segítségével lehetséges leírni olyan berendezéseket a tényleges fizikai valójukban, amelyeknek szimulációja más módszerekkel hosszú időbe telne.

2. Az áramlástan kialakulása

Az áramlástan nem más, mint egy fluidumnak (cseppfolyós és légnemű közegeknek) csövekben, csatornában vagy különféle ezek körüli szabad térben kialakuló áramlásával foglalkozó mérnöki tudományág.

Az áramlástan tudományával már az ókori Görögországban elkezdtek foglalkozni, amikor is Archimédész (i.e. 287-212) megalkotta a felhajtóerőről szóló törvényt. A tudományterület fejlődését elősegítő kutatások a középkor idejének eljöveteleig és az alatt sem folytatódtak jelentős mértékben. Viszont a XV-XVI. században ismét fellendült ezen a téren a kutatás, Leonardo da Vinci (1452-1519) több mint 500 éve publikálta híres könyvében, a Codex Atlanticus-ban azt az emberi erővel működtetett szerkezetét, mely, mint egy nagy csavar a levegőbe fúródva helyből emelkedhetett fel a földről. Ez már egy áramlástani alapokon nyugvó elképzelés volt, igaz nem lett kipróbálva. 200 év sem telt és több tudós is próbálkozott az áramlástan alapjainak a lefektetésével. Ilyen volt Evangelista Torricelli (1608-1647) a barométer megalkotója, Isaac Newton (1642-1727) a viszkozitással foglalkozott és Blaise Pascal (1623-1662), aki a hidrosztatika alapelveit fektette le. Ezt az utat folytatta a XVIII. században Daniel Bernoulli (1700-1782), aki az áramlástant matematikailag is megalapozta Hydrodinamica című művében. Számos matematikus, többek közt Joseph Louis Lagrange (1736-1813) (Lagrange függvény), Pierre Simon de Laplace (1749-1827) (differenciálegyenletek, matematika, analízis fejlesztése) Siméon-Denis Poisson (1781-1840) (Poisson-tényező), Leonard Euler (1707-1783) (Euler egyenlet) és Louis Marie Poiseuille (1797-1869) (lamináris áramlás leírása kör keresztmetszetű csőben) segítettek kibővíteni az áramlástanról addig megszerzett tudást. Később újabb matematikai összefüggéseket alkotott Claude-Louis Navier (1785-1836) és George Gabriel Stokes (1819-1903) (Navier-Stokes egyenletek), amikor beillesztették a fluidumok viszkozitási tulajdonságait a már meglévő egyenletekbe. Osborne Reynolds (1842-1912) meghatározta a Reynolds-számot, és azt, hogy kör keresztmetszetű csőben mely esetekben beszélünk lamináris és turbulens áramlásról.

A XX. században Ludwig Prandtl (1875-1953) meghatározta a határréteg elméletet, és az összenyomható folyadékok viselkedését. Kármán Tódor (1881-1963) is vizsgált egy áramlási jelenséget, amit ma már csak Kármán féle örvénysorként emlegetünk. A Kármán-féle örvénysornak hidro- és aerodinamikailag is nagyon fontos jelentősége van. Kármán Tódor adta az első elméleti magyarázatát sűrűlő közegbe helyezett testek mögött keletkező turbulens áramlásoknak. Áramló folyadékba vagy gázba helyezett, test mögött örvénytér keletkezik, amennyiben az áramlás eléri egy a test méretétől és alakjától függő minimális Reynolds-számot. A test szélein az impulzusmomentum megmaradásának tétele miatt egymással ellentétes irányba forgó örvények jönnek létre, melyeket elég nagy forgási sebesség elérése esetén – tehetetlenségük folytán – magával ragad a sűrűlő közeg, és az 1. ábrán látható jellemző képet alakít ki. Szintén a perdületmegmaradásból következik, hogy a leszakadó örvények egyenként követik egymást és ellenkező forgásirányúak. A leszakadó örvények ily módon kialakuló egymásutánját nevezik Kármán-féle örvénysornak.[2]



1. ábra: Kármán féle örvénysor sebességprofilja [10]

Geoffrey Ingram Taylor (1886-1975) statisztikailag írta le a turbulencia jelenségét, ezzel megalkotva a Taylor mikroskálát, ami egy olyan hossz lépték, ami a turbulens áramlás jellemzésére szolgál. A turbulencia iránt érdeklődve Andrey Nikolaevich Kolmogorov (1903-1987) és George Keith Batchelor (1920-2000) tovább mélyítették a fluidumok viselkedésével foglalkozó tudományok területén elért eredményeket.

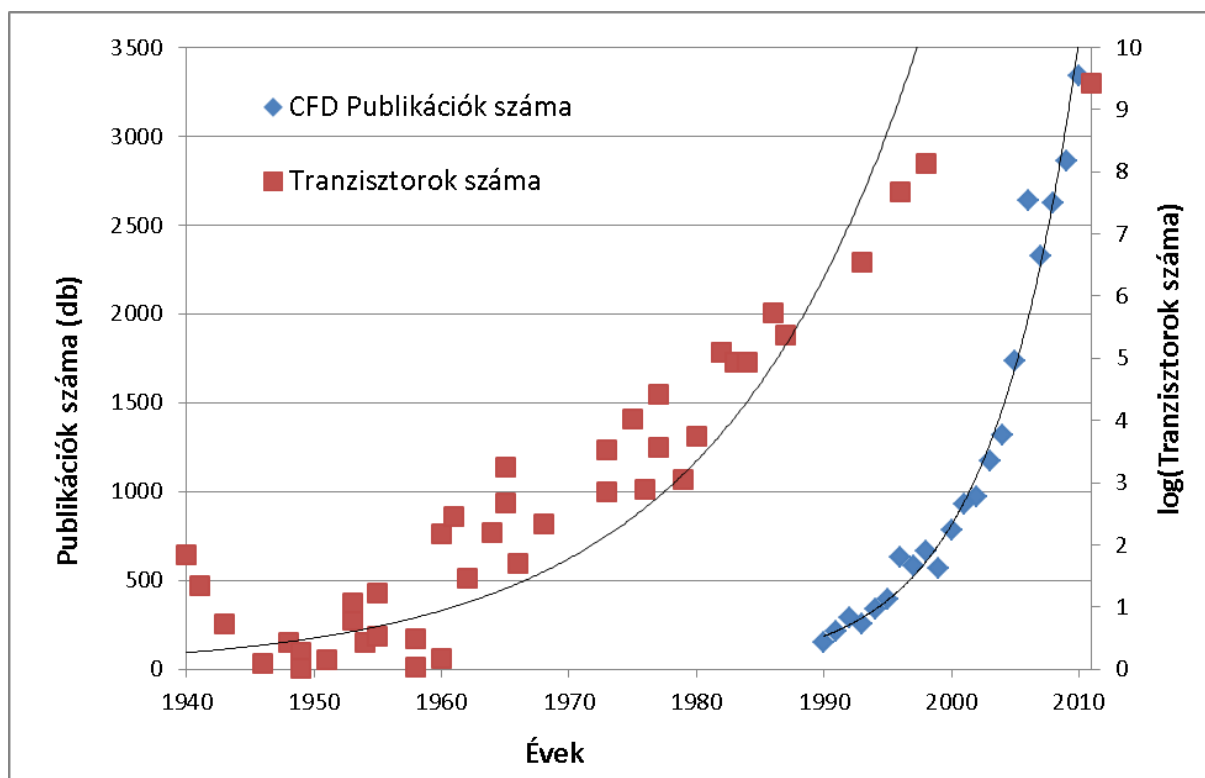
A következőkben a numerikus áramlástan alakulásának egy rövid áttekintését mutatom be, néhány gyakorlati jelentőséggel bíró példán keresztül mutatom be a tudományterület mai állását, illetve az abban rejlő lehetőségeket. Ezt követően a keverést és annak fontosságát mutatom be, végül a számításokhoz alkalmazott szoftvercsomagról ejtek néhány szót.

2.1. A CFD alakulása

Kérdéses, hogy melyik nagy tudós végzett először a maihoz hasonló CFD számítást. 1922-ben elkészült az első numerikus időjárás előrejelző rendszer, ám ez hat héten át tartó számolás után hibás eredményt adott. Ez a modell ki lett egészítve Richardson által egy a világ különböző részeiről érkező adatok feldolgozására szolgáló berendezéssel a világ különböző részeiről érkező adatfeldolgozóval. Ez a fejlesztett időjárás előrejelző rendszer nevezhető a CFD ősének. A 1953-ban Japánban egy henger körüli áramlást leíró modellt oldottak meg egy numerikus módszerrel.

1960-as évektől kezdtek megjelenni a ma is használt CFD kódok (Particle-In-Cell, Marker-and-Cell, Arbitrary Lagrangian-Eulerian módszer, stb.). Kereskedelmi forgalomban azonban, csak az 1980-as évektől kezdve lehetett beszerezni ezeket, hála a nagyobb cégeknek, akik a saját CFD szoftver kifejlesztése helyett inkább a piacon levőket alkalmazták.[12] Sajnos még a közönséges differenciálegyenleteknek is csak egy részére van egzakt megoldási módszerünk, az esetek nagy részében csak közelíteni tudjuk a pontos eredményt. A számítógépek gyors fejlődésének köszönhetően azonban, egyre inkább előtérbe kerülnek azon numerikus módszerek (véges differencia módszer (Finite Different Method - FDM), véges elemek módszere (Finite Element Method - FEM), véges térfogatok módszere (Finite Volume Method - FVM)), amelyek segítségével numerikusan meghatározhatók a keresett áramlástan paraméterek. A numerikus megoldás legfontosabb részét képezik a peremfeltételek és kezdeti értékek, ezeket kiegészítve a konzisztenciára, (numerikus) stabilitásra és a konvergenciára vonatkozó feltételrendszerrel, a valóságos áramlásra mérnöki-fizikai szempontból, esetenként, igen jó közelítést is kaphatunk, amely megoldások igen csak hasznosak lennének a fluidumok dinamikájának megértésében. [1]

A számítógépek adattárolási és feladatmegoldó képességei lehetővé tették a numerikus módszerek jóval nagyobb sebességgel való elvégzését. Három fő tényező játszott szerepet abban, hogy a CFD a folyamatmérnöki szakma egyre inkább szerves részévé válhasson. Ezek voltak a számítástechnika fejlődése, a széleskörű fizikai modellek fejlesztése és a fejlett numerikus algoritmusok. A 2. ábrán látható, hogy az 1990-es évektől kezdve milyen rohamos ütemben gyarapodtak e területhez kapcsolódó publikációk száma. Egyik fő oka a CFD elterjedésének a szimulációs idő drámai csökkenése volt, aminek oka a számítástechnika elmúlt évtizedekben tapasztalt rohamos fejlődése. A 2. ábra megmutatja, hogyan követték az IBM processzorokban lévő tranzisztorok száma a Moore törvényt az évek során, és ebből látható, hogy a következő években a számítástechnika fejlődése továbbra sem lassul, sőt inkább gyorsul.[8] Azt nem szabad elfelejteni, hogy a számítási teljesítmény növekedése általában az energiafogyasztás növekedésével jár. A számítástechnikában az elmúlt évtizedben elindult törekvés az, hogy az alkatrészek, amellet, hogy gyorsabb számítások elvégzésére legyenek képesek, lehetőleg ugyanannyit, de inkább kevesebbet fogyasszanak, mint elődeik. Ez azt is jelentheti, hogy a jövőben valamelyest vissza fog esni a számítási teljesítmény növekedése, s az eddigi tendenciától eltérően, kevésbé gyorsulva fog fejlődni a számítástechnika.



2. ábra: A ScienceDirect statisztikai adatai és a processzorokon lévő tranzisztorok száma [9]

A CFD az áramlástan problémáinak megoldása esetén a vizsgált teret véges elemekre, úgynevezett cellákra osztja fel, ezekre pedig megoldja az áramlástan alapegyenleteit (kontinuitás, anyag-, impulzus-, energiaegyenletek, transzportegyenletek, turbulencia jellemzők) a peremfeltételeket figyelembe véve. A szoftverek mára már a gyakorlati feladatok megoldására hatékonyan felhasználhatók. A numerikus áramlástan segítségével számítható – a teljesség igénye nélkül - hőátadás, hővezetés, kémiai reakciók, égés, többfázisú áramlás, forgógépek (turbina, szivattyú) működése, gázok terjedése és szuperkritikus anyagok viselkedése.

A numerikus áramlástanai számítások alkalmazása először az űrhajógyártásban terjedt el, de ma már számos területen használják sokrétűsége miatt. A CFD modelleket alkalmazó szoftverek lecsökkentik a gyártási és tervezési költséget, a bonyolultabb fizikai modelleket is megoldják. A ma piacon kapható CFD számítások elvégzésére alkalmas szoftverek kialakítása során törekednek arra a készítőik, hogy az egy könnyen alkalmazható program legyen. Néhány alkalmazási terület [4, 5, 6]:

Repülőipar: hőmérsékletingadozás okozta fluktuáció, gyorsulás vizsgálata, szélcsatornák iránti igény csökkentése (tényleges objektum egy kicsinyített modelljének való vizsgálata).

Hő- és áramlástechnikai gépek: kompresszor: kompresszor hatásfokának növelése, égőterekben és turbinákban lezajló folyamatok modellezése.

Gépjárműgyártás: kocsiszekrény aerodinamika, utastér ventilláció, áramlástanai rendszerek motorban, illetve segédberendezésekben való vizsgálata, üzemanyag-fogyasztás csökkentése.

Biztonságtan: tűz- és füstterjedés előrejelzés, robbanás és egyéb véletlenszerű folyamatok modellezése.

Meteorológia: hosszú- és rövidtávú időjárás előrejelzés, globális klíma modellek.

Gyártási folyamatok: keverési viszonyok optimalizálása, produktivitás növelése a könnyű-, a nehéz-, vagy a vegyiparban: acélgyártás, keveredési folyamatok, bevonómassza felvitele.

Épületgépészet: épületfűtés és szellőzés analízis, tűzvédelmi és külső aerodinamikai hatások vizsgálata.

Csillagászat: hozzájárulás a világegyetem eredet-kutatáshoz, galaxisok kialakulásának modellezése, mágneses viharok, napszél és hatása a Földre.

Telekommunikáció: vezeték nélküli hálózatok fejlesztése.

Nukleáris technikában: üzemelő atomerőművek, kutató és oktató reaktorok főberendezéseinek vizsgálata, kutatás-tervezés alatt álló atomreaktor-konceptciók alatt álló atomreaktor-konceptciók vizsgálata, fűzős berendezések egységeinek vizsgálata.

2.2. Néhány gyakorlati példa

A következő fejezetben néhány a tudományterülethez kapcsolódó gyakorlati jelentőséggel is bíró példát mutatok be:

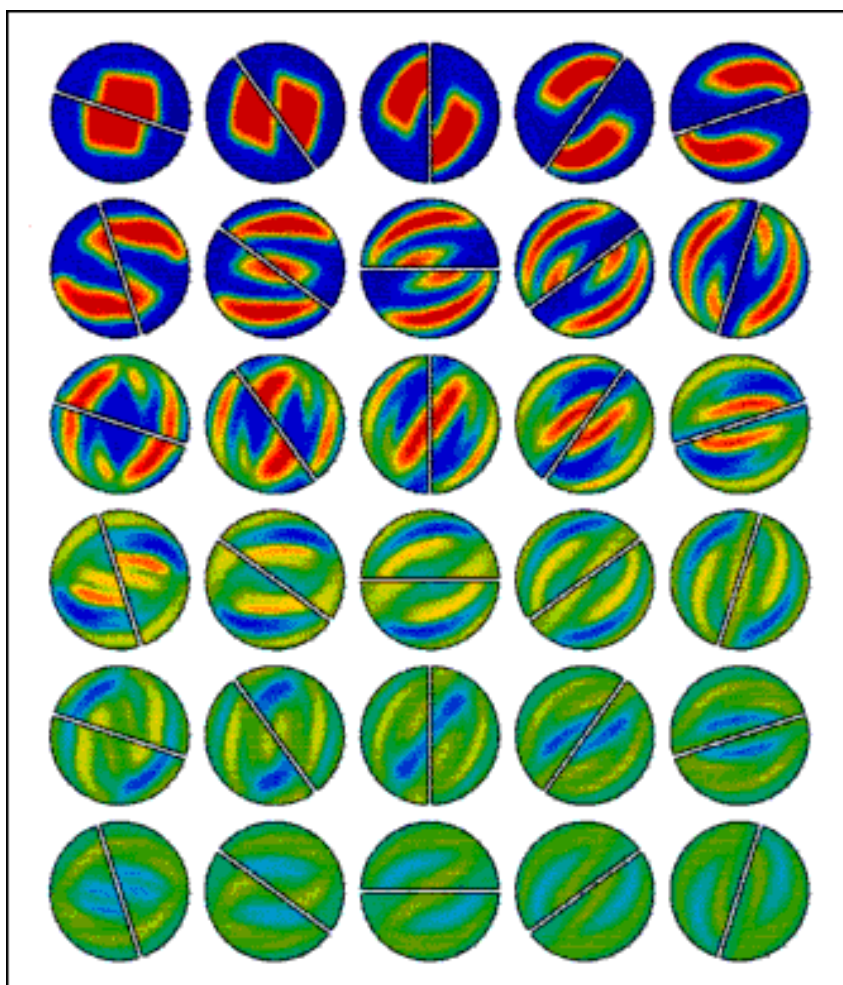
- Statikus keverő
- Szuperkritikus folyadék tulajdonságainak meghatározása
- Elfutási reakciók vizsgálata
- Kémiai reakciók kevert tartályban

2.2.1. Statikus keverő

Statikus keverőket széleskörűen alkalmaznak az iparban. Ezek a berendezések nem mások, mint csövek a bennük található mozdulatlan áramtörő lemezzel, amelyek kialakítanak egy áramlási mintát, mely a folyadékok, gázok keveredését okozza. Nagyon sok kutatás zajlott ezen a területen a geometriára és a nyomásesés javítása érdekében.

Bakker, Marshall, és LaRoche meghatározták a 90-es évek elején egy két komponensből álló elegy keveredését egy hatelemű statikus keverőben. A 4. ábrán a betáplálás középpontjában az egyik komponens áll (100 %), pirossal jelezve. A betáplálás külső részén pedig 100 %-ig a másik komponens található meg kék színnel. Az ábrán a sorok a koncentrációt mutatják a keverő elemszáma szerint, míg az oszlopok különböző forgatás utáni állapotokat mutatnak (18° , 54° , 90° , 126° , 162°). [16]

Az első elemben látható, hogy a piros mag két különálló részre próbál szakadni, nyúlni, és a cső oldala felé orientálódni. A kék rész pedig két félkör alakú részre osztozik, amik a cső belseje felé mozognak. A harmadik elemnél lehet látni, hogy a kék rész már a cső közepén található, a koncentrációprofil teljesen átalakult. Ezeknek az osztódási, nyúlási, behajlási folyamatnak az ismétlése látható minden második egységben, amíg a fluidum nem válik kevertté, zöld színűvé. Az elemek száma általában 6-18 db között szokott változni. [17]



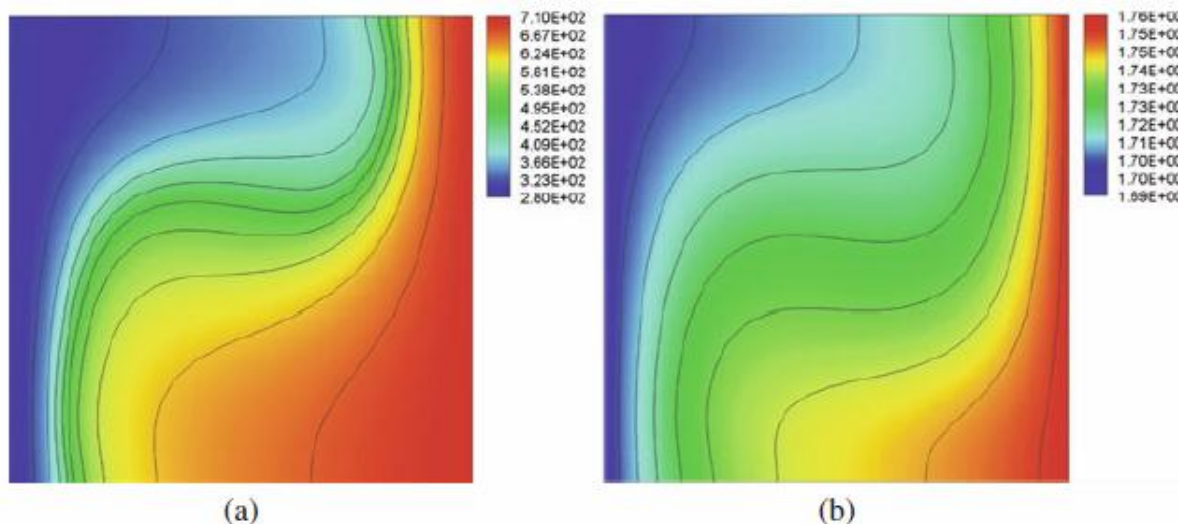
3. ábra: Koncentrációprofilok a keverőben

2.2.2. Szuperkritikus folyadék szimuláció a kritikus ponton túl

Sok anyagot ismerünk, például víz, oxigén, szén-dioxid, stb., és minden anyagnak megvannak a saját termodinamikai tulajdonságai (sűrűség, viszkozitás, hővezetés, fajhő, stb.). Ezek a tulajdonságok a környezet hatására változhatnak, és a kritikus pont közelében kritikus állapotba kerülhetnek. Kritikus pont az a hőmérséklet, nyomás, térfogat, amely állapotban az anyag közvetlenül megy át folyékony halmazállapotból légneműbe és viszont. CFD szimulátorokkal alacsony és nagy sebességű szuperkritikus folyadék áramok termodinamikai tulajdonságai is meghatározhatóak a kritikus ponton túl. [12]

Ilyen példaként mutatnám be Davis kísérletét, ahol szén-dioxid kétdimenziós szabad konvekcióját vizsgálta két párhuzamos lap között. [11] A vizsgálat során feltételezték, hogy a Rayleigh-szám (Grashof és a Prandtl szám szorzata) 10^4 értéket vesz fel légköri nyomáson és hőmérsékleten. A hőmérsékletek a bal és a jobb lapon 303 és 313 K voltak, a nyomás 0,1 MPa. Mikor a nyomást megnövelte 8 MPa-ra a fázis mind szuperkritikus fluidum mind folyadék halmazállapotban is jelen volt a rendszerben.

Az 5. ábra jól mutatja a sűrűség változását szuperkritikus és légköri nyomáson. Jól látható, hogy két nagyságrendbeli változás következik be a nyomás növelés hatására, mivel a szén-dioxid az 4.a ábrán szuperkritikus fluidum, míg a 4.b ábrán gáz halmazállapotban van. A sűrűség a légköri nyomáson szinte konstans, de mint a képen is jól látható szuperkritikus pont felett 2,5-szeres különbség van a legkisebb és legnagyobb nyomás között. Ugyanilyen drasztikus különbség tapasztalható más anyag, más tulajdonságok összehasonlítása között is.



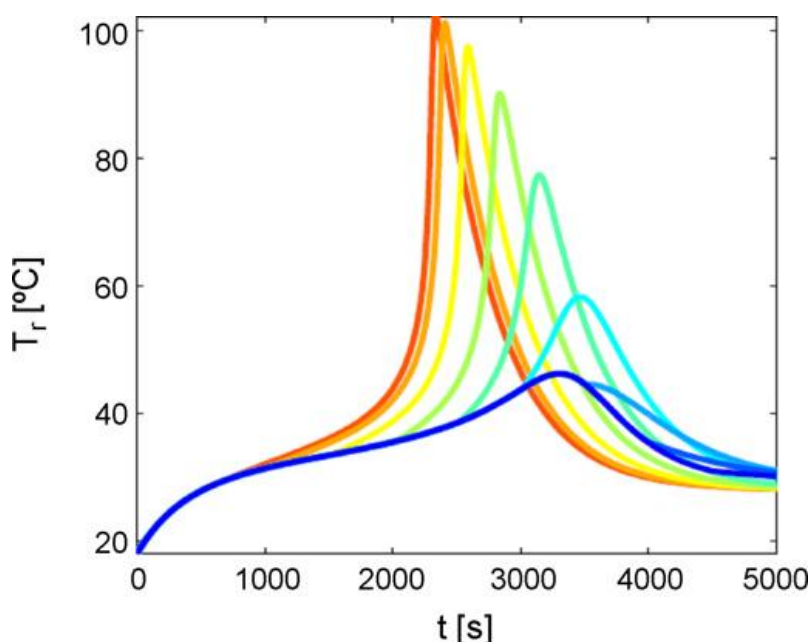
4. ábra: Számított sűrűségeloszlás. (a) 8 MPa, (b) 0.1 MPa

2.2.3. Elfutási reakciók vizsgálata

A hőmérséklet elfutás (vagy termikus elfutás) exoterm kémiai reakciók eredményeként jöhet létre. A jelenség abban az esetben következik be, ha a keletkező hőmennyiség meghaladja az elvont hőmennyiséget. Ekkor a hőmérséklet növekedése olyan módon változtatja meg a körülményeket, hogy azok a hőmérséklet további növekedéséhez vezetnek, így gyorsabb reakció lefutáshoz, ami még több hőt generál és végül a reaktor robbanása is

bekövetkezhet. Leggyakrabban a reakciósebességi állandó, így a reakció hőtermelése is exponenciálisan növekszik a hőmérséklettel, így nehéz leállítani egy ilyen termikus elfutást. Kutatások bizonyítják, hogy ezek a folyamatok okozzák az ipari balesetek közel negyedét, ezért tanulmányozásuk rendkívül fontos biztonságtechnikai szempontból.

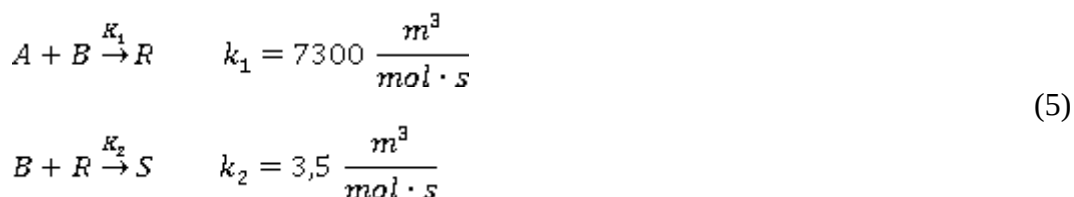
Az elfutás kiváltó okainak legtöbbször a keverő berendezés és a hűtőrendszer, és maga a tervezés hibáját nevezik meg. [14] Esetlegesen előfordulhatnak exoterm hőszínezetű mellékreakciók, amik szintén a termikus elfutás bekövetkezését segítik elő. Például egy polimerizációs reakció esetén, ahol a reakció lefutása során nő a viszkozitás és lokális „meleg pontok” alakulnak ki, a nem megfelelő kevertetés a rendszer globális elfutásához vezethet. A 7. ábrán 500 másodperc elteltével újra és újra csökkentjük a fordulatszámot 800 fordulat/percről 50 fordulat/percig. Jól látszik, hogy a keverőelem elromlásával, a rendszer hajlamosabb a hőmérséklet elfutásra, akár a reaktor robbanására is.



5. ábra: A keverőrendszer hibájának hatása a hőmérsékletre (800-50 fordulat/perc) [15]

2.2.4. Kémiai reakciók kevert tartályban

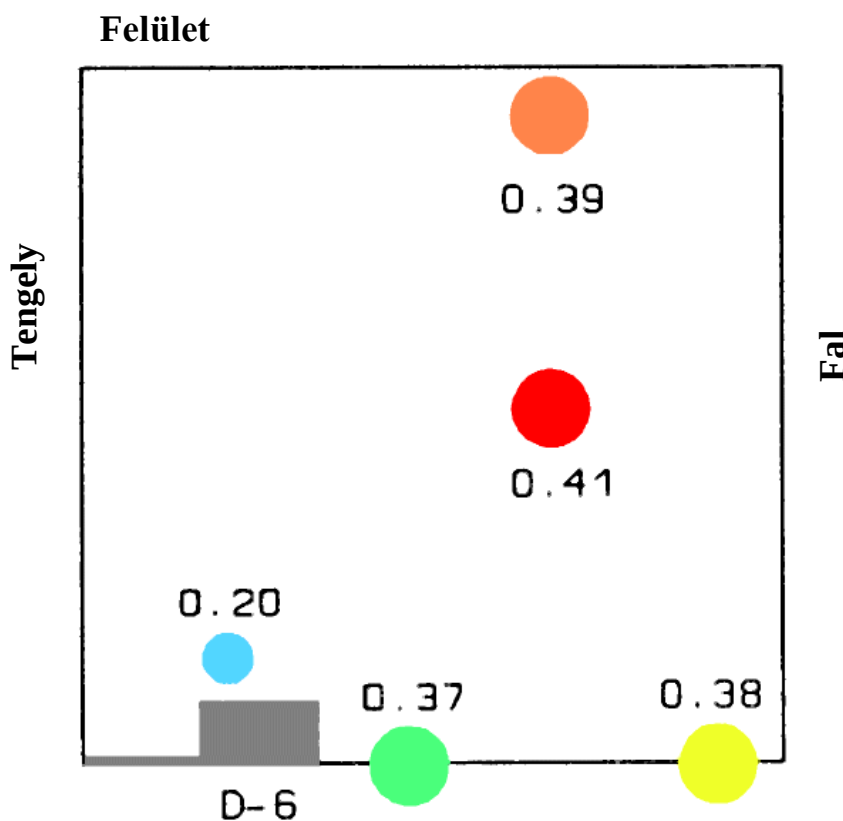
A kémiai reagensek elegyítése egy hétköznapi művelet a folyamatiparban. Ám nem mindegy, hogy milyen reakciórendszer van jelen, és az hogyan befolyásolja a fő termék eloszlását. Ezt befolyásolhatja az is, hogy a betáplálás helye hol található a reaktoron. 1993-ban Bakker és Fasano [18] CFD szimulátorral meghatározták egy kompetitív-konszekutív reakciórendszer termékeloszlását. A reakciók az alábbiak:



Ezt a reakciórendszert már 1981-ben Bourne [19], és 1986-ban Middleton [20] is vizsgálta. Két különböző méretű reaktort alkalmaztak (30 és 600 liter), a méretének megfelelő keverővel ellátva. A reaktánsok ekvimoláris arányban kerültek bevezetésre a reaktorba. Míg

az A komponenst egyenletesen táplálták be a tartályba, addig a B komponens egy kis régióba került betáplálásra az A-hoz képest nagyobb koncentrációval.

A melléktermék képződését vizsgálták a betáplálás helyétől függően. A 6. ábrán jól látható, hogy ha a betáplálás a keverőelem fölé kerül, akkor nagyobb turbulenciájú részt az áram rögtön átlépi, és a lokális keveredés nem limitálja a főreakciót. Ebben az esetben a termékeloszlás feleakkorára esik, mint más betáplálási helyek esetében.



6. ábra: A termék konverziójának vizsgálata különböző betáplálási helyek esetén [21]

2.3. Keverés

Egy reaktor tervezésénél mindig ügyelni kell a benne lejátszódó folyamatokra (hőátadás, komponensátadás, reakció lejátszódása), az optimális üzemeltetési paraméterekre, megfelelő fázishomogenizálásra. A berendezések keveredési viszonyai, áramlási képei már elég jól lettek térképezve az elmúlt évek, évtizedek során, ám ha reakciót szeretnénk lejátszatni a berendezésben, akkor legalább ennyire fontos, hogy a komponensek megfelelő sebességgel, megfelelő helyen legyenek betáplálva, mert csak így biztosítható a kívánt konverzió elérése.

A keverésnél két vagy több (egymástól eltérő anyagi tulajdonsággal bíró) anyagot kényszeráramlással egyesítünk, homogenizálunk azért, hogy az egyes alkotórészek eloszlása a legkisebb térfogatelemekben is a kívánt keverési aránynak feleljen meg. Homogenizálás fogalma alá tartozik:

- a szuszpendáltatás;
- a diszpergáltatás;
- az egymásban nem oldódó folyadékok emulgeálása;
- a hőcsere intenzifikálása.

Levenspiel [13] figyelembe vette, hogy ha két fluidum keverve van, a molekuláris viselkedése az elegynek két extrém eset közé eshet. Ha a molekulák szabadon mozoghatnak, akkor a diszpergált anyag mikrofluidumként viselkedik, és nem mutat szételegyedést. Ellentétes esetben, a diszpergált anyag sok molekulát tartalmazó csoportokban marad és makrofluidumként kezeljük. Továbbá ha a makrofluidum mikrofluidummá alakul fizikai keverés hatására (turbulencia vagy molekuláris diffúzió), a szételegyedés foka és aránya csökkenni fognak.

A keverni kívánt anyag tulajdonságait vizsgálva beszélhetünk önként keveredő anyagokról, amik alatt legtöbbször gázokat, vagy kis viszkozitású folyadékokat értünk. Meg kell említeni a kevertégi állapotát megőrző anyagokat, amelyek nagy viszkozitású folyadékok, vagy szilárd anyagok, valamint a szétváló anyagok csoportját jelentik. Ez utóbbiba tartoznak a szuszpenziók, emulziók, vagy gáz-folyadék rendszerek.[3]

A keverés hajtóereje legtöbbször a sebességkülönbség vagy mechanikai hatás. A keverés célja függ az elegyíteni kívánt fázisok számától:

- Egyfázisú folyadékoknál: koncentráció, vagy hőmérséklet kiegyenlítés, homogén fázisú reakciók lejátszása.
- Folyadék-folyadék extrakciónál: szételegyedés meghatározása.
- Viszkózus folyadéknál: hőmérsékletkiegyenlítés.
- Folyadék-gáz rendszereknél: gázdiszperzió kialakítása, abszorpció, reakciógyorsítás, habképzés.

A keverés leírására és annak számítására, mérésére az alábbi mérőszámokat vezették be:

- Keverési Reynolds szám: az áramlás jellegét adja meg a keverőben a tehetetlenségi és a viszkózus erők hányadosaként.

$$Re = \frac{dv}{\nu} = \frac{d\omega r}{\nu} = \frac{2\pi n r d}{\nu} = \frac{2\pi n d^2}{2 \cdot \nu} = \frac{\pi n d^2}{\nu} = \frac{d^2 n \pi \rho}{\eta} \quad (1)$$

- Keverési Euler szám: dimenziómentes szám, amit áramlási számításoknál használnak. A helyi nyomásesés, és a térfogatra vonatkoztatott kinetikai energia hányadosa.

$$Eu = \frac{P}{\rho v^2} \quad (2)$$

- Froude szám: a keverőben uralkodó tehetetlenségi és nehézségi erő hányadosa.

$$Fr = \frac{dn^2}{g} \quad (3)$$

- Teljesítmény szám: a keverő teljesítményszükségletét határozhatjuk meg a segítségével. Az M a képletben a keverőelem nyomatékát jelenti.

$$Po = \frac{2\pi NM}{\rho N^3 D^5} \quad (4)$$

- Dimenziómentes keverési idő: dimenziómentes mérőszám - amit a keverőelem fordulatszámanak és a keverési időnek a szorzatából számíthatunk - melyből a megfelelő keveredésre következtethetünk belőle. Leginkább a reakciónál van jelentősége a komponensek megfelelő eloszlására adhat információt. A kereskedelemben ma már számos

CFD számítások elvégzésére alkalmas szoftver elérhető. A dolgozatban a kidolgozott modellek implementálására és megoldására a COMSOL Multiphysics program került alkalmazásra, így a következő fejezetben ezt mutatom be röviden.

2.4. COMSOL Multiphysics

A COMSOL Multiphysics egy véges elemek módszerét (Finite Element Method, [7]) alkalmazó programcsomag. A véges elemek módszere egy numerikus módszer parciális differenciálegyenletek megoldására. A módszer lényege, hogy a vizsgált, tetszőleges geometria kialakítású, tetszőleges peremfeltételű, és tetszőleges feltételekkel rendelkező testet véges számú, kicsiny, de geometriailag jól meghatározott cellákból, az ún. végelemekből felépített modellel helyettesítjük. Ezek az elemek csak a csomópontjaikban kapcsolódnak egymáshoz. E végelemekből kialakított háló felületein különféle fizikai kényszereket, úgynevezett peremfeltételeket adunk meg.

Kitűnően alkalmazható parciális differenciálegyenletek megoldásához, a különböző tudományterületek törvényei elkülönítve találhatók meg, így a modellalkotás menete lényegesen meggyorsul. Az alkalmazott program legfontosabb tulajdonságai:

- véges elemek módszerén alapuló hatékony numerikus megoldó módszerek;
- teljes modellezési környezet, akár AutoCAD, Solidworks ábra is importálható;
- számos specifikus modul (Chemical Engineering, Heat Transfer, MEMS (Mikroelektromechanikus Rendszerek), Structural Mechanics, stb.), egyenletorientált megközelítés, kész mintaalkalmazások
- különböző fizikai folyamatok együttes szimulálása (Multiphysics);
- lehetőség van a MATLAB programcsomaggal való összekapcsolásra is;

A szoftverben először a számunkra megfelelő geometriát kell megválasztani, ezután a modellegyenletek kiválasztása következik. Megalkotjuk, esetleg importáljuk a geometriát, végül a modellegyenletekben szereplő paramétereket definiáljuk (Subdomain), és a peremfeltételeket rögzítjük (Boundary).

Ezzel a modellalkotás folyamata befejeződik és annak megoldása következik. Ezt a háló generálásával kell kezdeni. Ez azért fontos lépés mivel ha a felbontást növeljük, akkor a modell megoldása is pontosabb lesz, viszont a megoldási idő jelentős mértékben nő. A program először a megalkotott geometriát véges számú elemre bontja fel, majd a diszkretizálás eredményeként, az elemekben már az algebrai összefüggéseket generálja le. A megoldott modell lehet dinamikus és stacioner is. A vizsgálatok során egy folyamatos reaktor stacioner modelljeit dolgoztuk ki és oldottuk meg, illetve a tartózkodási eloszlás sűrűség függvények meghatározásánál a program dinamikus modelljét is használtuk. A modell megoldását követően az eredmények kiértékelése következik.

A vizsgálatok a következő paraméterekkel rendelkező számítógépen lettek lefuttatva:

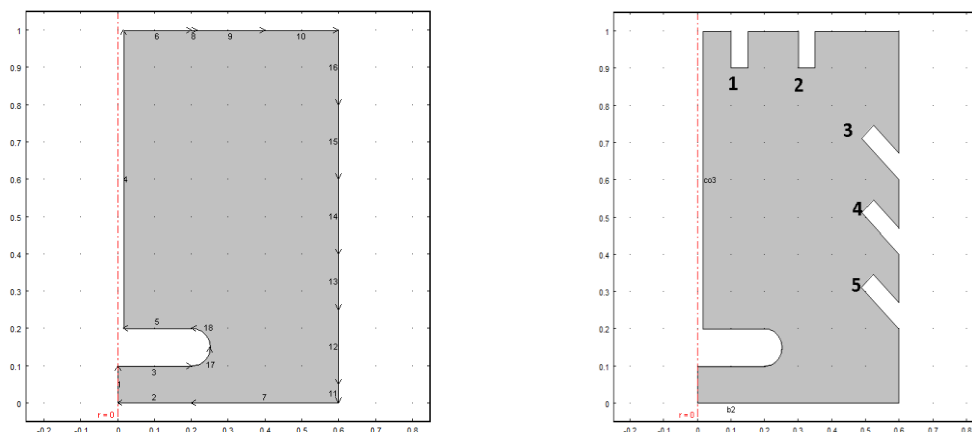
- Processzor: Intel Core 2 CPU 6400 @ 2.13 GHz
- Memória: 8,00 GB
- Operációs rendszer típusa: Windows 7 Enterprise, 64 bit

A számítások átlagosan fél és másfél óra között futottak le.

3. A kevert berendezés CFD modelljének megalkotása

A modellt a COMSOL Multiphysics *Chemical Species Transport* modul, *Transport of Diluted Species* modelljéből (komponensmérleg), és a *Fluid Flow* modul, *Single Phase* almoduljának, *Laminar Flow* modelljéből (impulzusmérleg) épül fel. A vizsgálat során a rendszer időben állandósult állapotát számítottuk.

A vizsgált reaktor forgásszimmetrikus, így nem szükséges egy háromdimenziós geometria kialakítása. A reaktort ezért két dimenzióban vizsgáltam, amely esetén a *swirl flow* modell használandó, amely forgó berendezés által generált áramlások számítására alkalmas. A két dimenzióra való egyszerűsítés a számolás idejét lecsökkenti, de aszimmetrikus keverőelem esetén nem használható. A modell geometriáját a 7. ábra, mutatja, bal oldali ábrán a betáplálós vizsgálatok geometriája látható, a jobb oldalin pedig a beinjektálós geometriát mutatja be. A betáplálás mindig a reaktor falán történt az injektálás pedig egy benyúló csomkon. Az elvétel betáplálós esetben a 2-es szakaszon történt, míg injektálós esetben a 12-es szakaszon



7. ábra: Betáplálási és beinjektálási geometria

Először az elkészített szimulátorokban alkalmazott mérlegegyenleteket és a hozzájuk tartozó peremfeltételeket mutatom be, a két vizsgált geometria esetén. Az injektálási csomkok közül természetesen egyes vizsgálatok esetében, csak egyet-egyet hagytam meg, a többi csomk olyankor nem létezett. Először a lamináris áramlást leíró impulzus-mérlegegyenletet mutatom be, amire a modellben a Navier-Stokes összefüggést alkalmaztam.

$$\rho(\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u}=\nabla\left[-p\mathbf{I}+\mu(\nabla\mathbf{u}+(\nabla\mathbf{u})^T)-\frac{2}{3}\mu(\nabla\mathbf{u})\mathbf{I}\right]+\mathbf{F} \quad (6)$$

$$\nabla(\rho\mathbf{u})=\mathbf{0} \quad (7)$$

2. perem: kilépő – kilépési áramsűrűség. Kilépési sebességet, úgy adtam meg, hogy a felülethez számoltam előre tervezett térfogatáram-sűrűséghez kilépési sebességet, így a tömegmérleg nem okoz gondot a számolásban. A 7. ábra jobb oldalán ugyanott található a kilépő felület. Ez minden vizsgálat esetén ugyanott található.

$$\mathbf{u}=\mathbf{U}_0\mathbf{n} \quad (8)$$

3-4-5-17-18. peremek: Fal – csúszó fal. Ezen a peremen vesszük figyelembe a keverőelem forgó mozgását. A fal mozgási sebességének, φ komponensének a fordulatszámából számolt kerületi sebességet adtam meg. Természetesen a 7. ábrán látható injektálós geometria esetén keverőszárára és lapátjára is ez a peremfeltétel van alkalmazva.

$$un = 0, \quad ut = U_w \quad (9)$$

1. perem: Axiális szimmetria. Ez a fajta perem csak a szimmetriatengelyeknél alkalmazható. A perem mindkét geometriában ugyanott található. Ez az a perem, amely ténylegesen a reaktor szimmetria tengelyét jelöli.

$$un = 0, \quad ut = U_w \quad (10)$$

7-8-11-13-15. peremek: Fal - nem csúszó. Ezzel lehet definiálni egy átlagos szilárd fal hatását. Az injektálós geometria esetén a benyúló csomók oldalsó részeire is ez a peremfeltétel értelmezhető.

$$u = 0 \quad (11)$$

6-9-10-12-14-16. peremek: Bemenet - sebesség. Ezeket a betáplálási, és beinjektálási helyeket vizsgálom a dolgozat során. Természetesen az egyes esetekben csak egy-egy perem marad betáplálás a többi átalakul nem csúszó fallá. A betáplálási csomók végén található peremet is „bemenet – sebesség” peremfeltétellel láttam el.

$$u = -U_0 n \quad (12)$$

Másodszor pedig a komponens mérlegegyenleteket mutatom be. Ezek használandók a reakciók, a diffúzió és az áramlás által okozott koncentrációváltozás számítására. Jelen esetben két komponenssel számolunk, mivel a reakció, k reakciósebességi állandóval a következő:

$$c_1 \rightarrow c_2 \quad (13)$$

$$\nabla(-D_i \nabla c_i) + u \nabla c_i = R_i \quad (14)$$

$$N_i = -D_i \nabla c_i + u c_i \quad (15)$$

Az egész mérlegegyenletet össze kell kötni a már előzőleg bemutatott impulzusmérleggel a konvekció és diffúzió almenüben. Ehhez a lamináris modell által kiszámolt u és w sebességeket megfeleltetjük a komponensmérleg által használt sebességtér koordinátáknak. Ezen kívül a komponensmérleg megoldásához szükség van a diffúziós állandók rögzítésére, a modellt mindkét komponens esetén $1e-5 \text{ m}^2/\text{s}$ értékkel számoltam. A modellben az alábbi alakú komponensmérleg egyenletet alkalmaztam:

$$\nabla(-D_i \nabla c_i) + u \nabla c_i = R_i \quad (16)$$

$$N_i = -D_i \nabla c_i + u c_i \quad (17)$$

1. perem: axiális szimmetria. Ez a fajta perem mindkét geometriában csak a szimmetria tengelyeknél alkalmazható.

$$n(D_i \nabla c_i) = 0 \quad (18)$$

2. perem: kiáramlás. Itt a komponens egyszerű kiáramlásáról beszélhetünk a rendszerekből. Ennek a peremnek a felületi integrálja alapján határoztam meg a későbbi konverziót, ami az esetek összehasonlításának az alapja.

$$-n D_i \nabla c_i = 0 \quad (19)$$

3-4-5-7-8-11-13-15-17-18. peremek: Szigetelés. Anyag nem áramolhat át rajta, szilárd fal tulajdonsággal bír. Beinjektálás esetében a csomók oldalaira is ez a peremfeltétel van beállítva.

$$-nN_i = 0 \quad (20)$$

6-9-10-12-14-16. peremek: Beáramlás. Ezeket a betáplálási helyeket vizsgálom végig a dolgozat során. Az egyes vizsgálatok során, ezen betáplálási helyeket egyesével fogom vizsgálni, a többi peremet ilyenkor falként definiálom.

$$c_i = c_{0,i} \quad (21)$$

A számolást segitendő a kezdeti értékeknél megadhatunk a reaktorban kezdeti koncentrációértéket. A reakció alpont alatt pedig definiálhatjuk a lejátszódó reakciókat. A vizsgálatok során az alábbi komponensmérleget alkalmaztam:

$$\nabla(-D_i \nabla c_i) + u \nabla c_i = R_i \quad (22)$$

A modell felépítését követően a kialakított geometriát véges elemre bontottam fel, s az ily módon kapott a szimulátor már alkalmas arra, hogy a fordulatszámot változtatva vizsgáljuk a reaktor kevertségének alakulását a különböző kialakítások esetén.

4. Eredmények

Vizsgálatom célja egy reaktor optimális, betáplálási, beinjektálási helyeinek meghatározása, mely agazdaságilag elérhető a legmagasabb konverziót eredményezi. Ehhez megvizsgálom hat különböző lapátgeometria kialakítást, és vizsgálom a fordulatszám hatását a konverzióra. Ezután a betáplálási helyek hatását fogom vizsgálni a fordulatszámra mindegyik lapátgeometria kialakítás esetén. Ezt a vizsgálatot elvégzem injektálási csomópontok esetén is. Végül az addig bemutatott eredményeket alátámasztom a tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvényével.

4.1. A lapátgeometriák vizsgálata

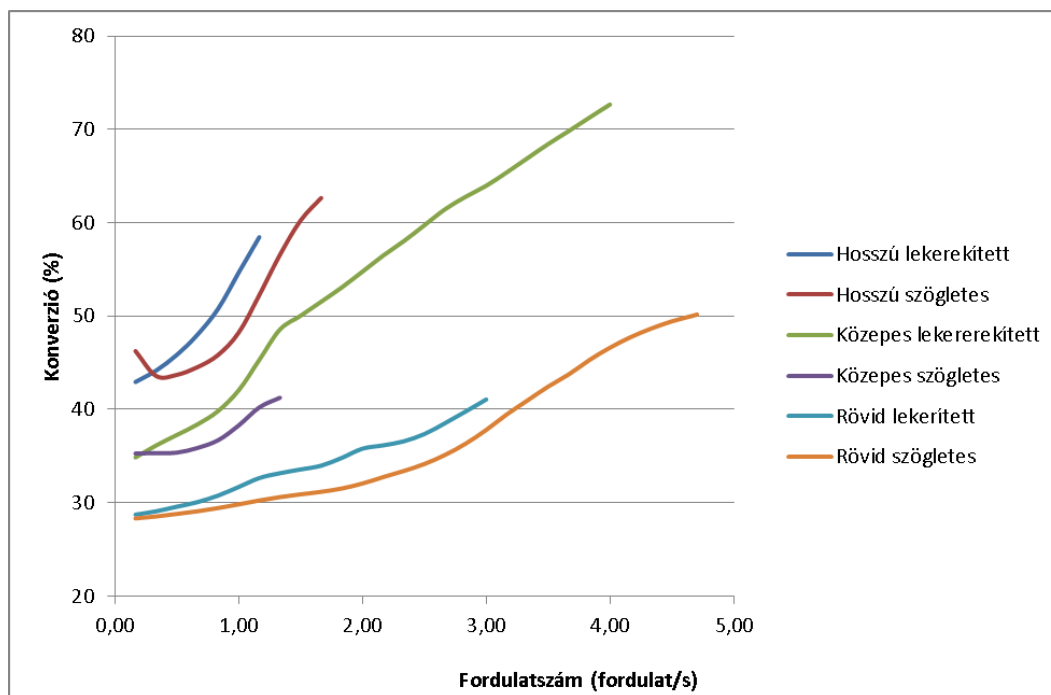
Két alapvető lapátgeometria esetén a reaktorban a konverziót: kerek és szögletes kialakítású lapátok. A kerek kialakítás esetén 0.15 m, 0.25 m, 0.35 m a szögletes kialakítás esetén pedig 0.1 m, 0.2 m, 0.3 m van a lapát vége a szimmetriatengelytől. Mindegyik lapát kialakítás esetén a fordulatszám értékét változtattam 10-300 percenkénti fordulat értékig és vizsgáltam, hogy miként alakul a reaktor működésére jellemző konverzió. A modell alkalmazásának paraméterei:

Reaktor magassága	1	m
Reaktor sugara	0,6	m
Keverőszár sugara	0,015	m
Keverő hossza	0,9	m
Keverőelem magassága	0,1	m
Betáplálás átmérője	0,4	m
Diffúziós állandók	1E-5	m/s
Sűrűség	1000	kg/m ³
Viszkozitás	0,1	Pas
Reakciósebességi állandó	0,04	1/s
Betáplálási koncentráció	1000	mol/m ³
Betáplálási térfogatáram	0,01256	m ³ /s

1. táblázat: Modell paraméterek

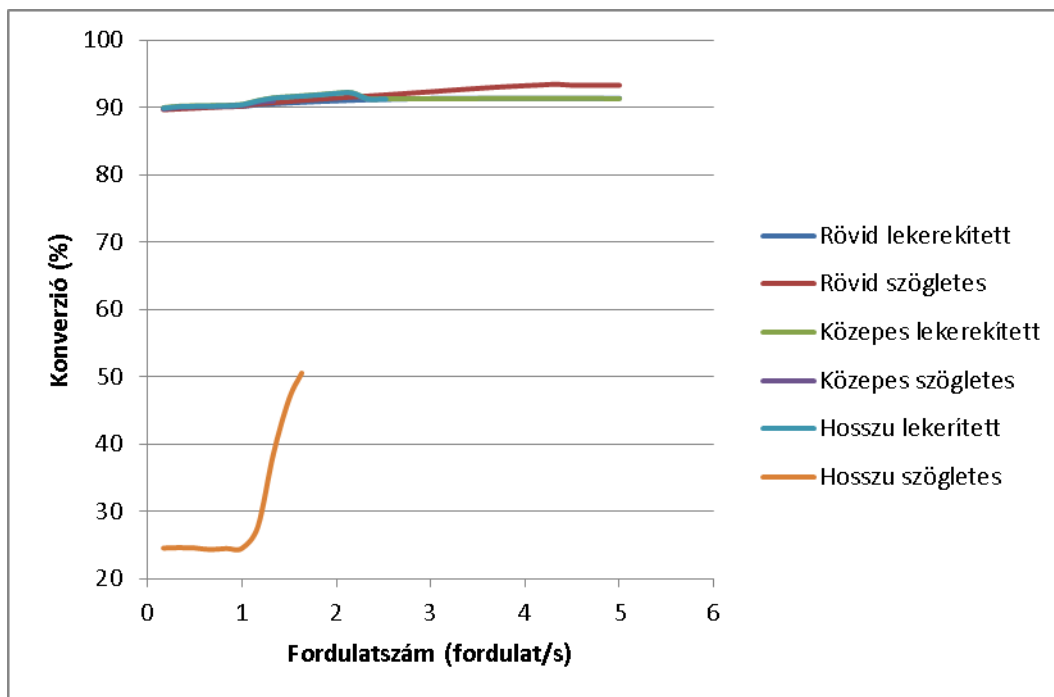
A vizsgálatok során azt tapasztaltam, hogy némelyik lapátkialakítás esetén nem tudta a szoftver elérni a kitűzött 300 fordulat/perc-es keverési sebességet, még akkor sem, ha az alkalmazott véges elemek méretét jelentősen csökkentettem. Ez valószínűleg azért történhetett, mert a keverőlapát és a kilépő felület között az áramlás letörik, ami a kerületi sebesség megnövekedését eredményezi, így az áramlás eljut a turbulens tartományba. Ezt az alkalmazott lamináris áramlási modell már nem tudja kezelni. Az eredmények jelentős kapcsolatban állnak a tartózkodási idővel, illetve a tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvényekkel is, ezek hatását később a 4.4. fejezetben fogom bemutatni.

A 8. ábrán is jól látható, hogy a keverési sebesség akár jelentős hatással lehet a konverzióra, a közepes lekerekített keverőelem kialakításnál akár 52,3 %-os relatív konverziónövekedést is eredményezhet a fordulatszám megháromszorozódása, míg például a rövid lekerekített esetben ez csak 4,8 %-os növekedést jelent. Azonban azt nem szabad figyelmen kívül hagyni, hogy minden pozitív mértékű eltérés a konverzióban jelentős hatással lehet egy technológia gazdaságossági mutatóira. A rövid lapátkialakítások esetén a konverzió értéke a fordulatszám növelésével szinte lineárisan változik. Tapasztalható még, hogy a rövid szögletes lapátgeometria esetén van egy maximum, ennél a fordulatszámnál a legmagasabb a konverzió abban a kialakításban.



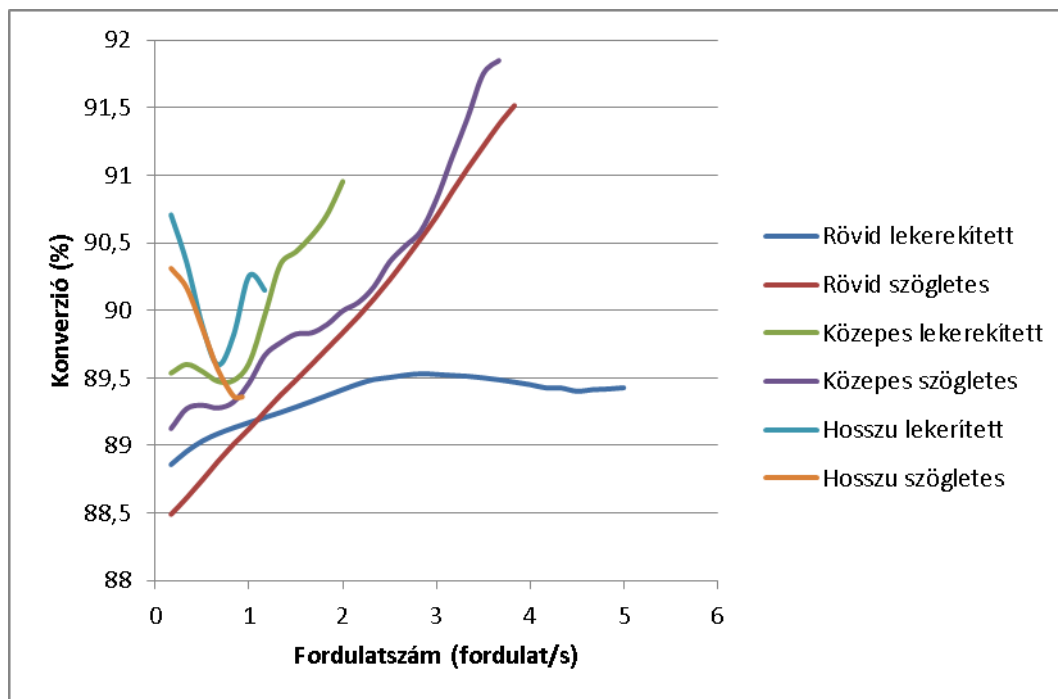
8. ábra: Keverőszár melletti betáplálás esetén vizsgált lapátgeometriák konverzió - fordulatszám diagramja

Az 9. ábra esetén még mindig a reaktor felső részén található a betáplálás, de itt már a keverőszártól távolabb a reaktorfedél szélén. Ebben az esetben is a hosszú szögletes lapátkialakítás esetén számított konverzió az, amely 60 fordulat/perces fordulatszámtól kezdve nagymértékű növekedésnek indult a többi kialakításhoz képest. Ennél a betáplálásnál a többi lapátgeometria kialakítás hasonló eredményeket adott.



9. ábra: A reaktor fedél szélén való betáplálás esetén a lapátgeometriák konverzió - fordulatszám diagramja

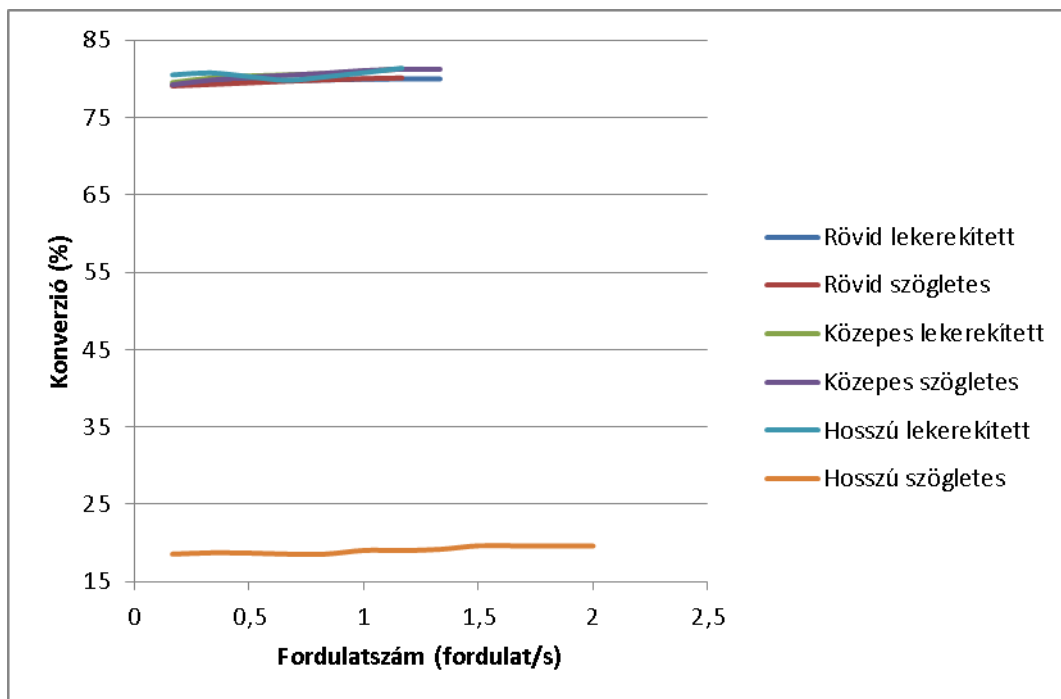
A következőkben ismertetném a reaktor oldalán való betáplálás eredményeit. Itt három helyen történt vizsgálat: a reaktor oldalának a tetején, a középső részén, és az alján. A 10. ábra e három közül az elsőt mutatja be. Mivel ez van a legtávolabb a kilépési felülettől, és hasonló távolságra van, mint a reaktor felső részének a szélén való betáplálás esetén, ezért azt vártuk, hogy hasonló értékeket adnak a vizsgálatok, és ez a kettő lesz a legmagasabb konverziókkal rendelkező. Ennek megfelelően alakult a 10. ábra. A kapott konverziók mind 90 % körül mozognak, igaz a legnagyobb százalékos változás is csak 3,4 %, de ez a kismértékű növekedés is jelentős javulást jelenthet egy technológia gazdasági teljesítőképességében. Látható, hogy a rövid szögletes kialakítás esetén szinte egy lineáris összefüggést kaptunk a konverzió – fordulatszám összefüggésre, illetve hogy a hosszú szögletes kialakítás esetén a fordulatszám növelése, pedig csak negatívan befolyásolta a konverziót. Látható itt is és a többi diagramon is, hogy minél nagyobb egy keverőelem átmérője a program annál nehezebben talál konvergens megoldást adott finomságú háló esetén, illetve a szögletes kialakítással is könnyebben tud számolni a program.



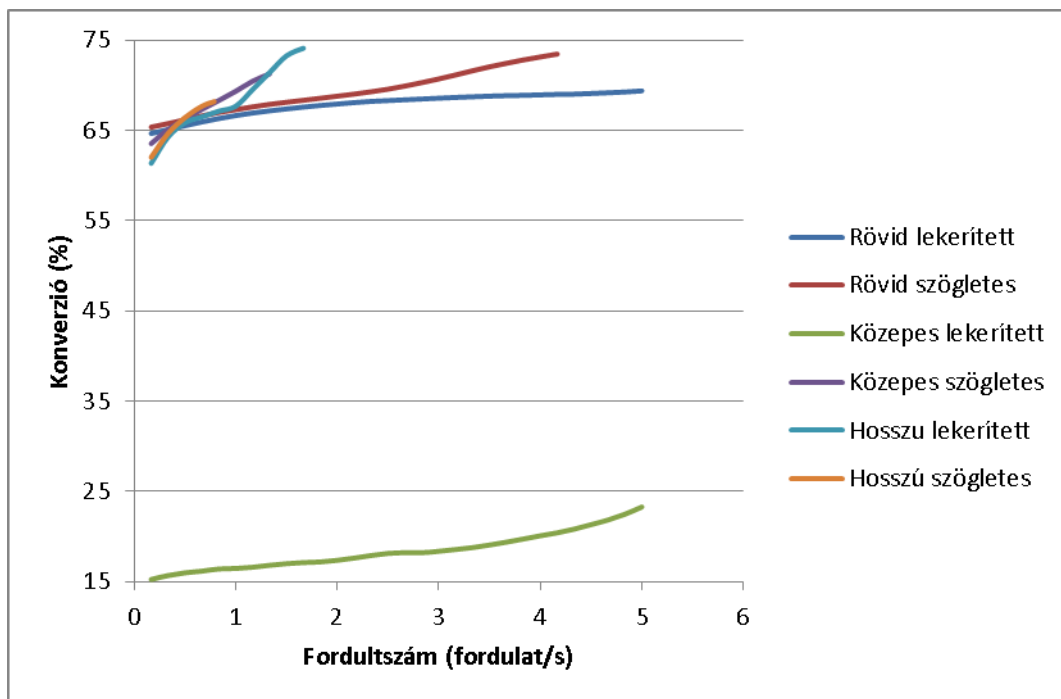
10. ábra: A reaktor oldalának felső részén való betáplálás esetén vizsgált lapátgeometriák konverzió - fordulatszám diagramja

A reaktor oldalának a középső részén való betáplálás esetén a hosszú szögletes lapátgeometria ismét a legrosszabb eredményt adta, csupán 20 % között mozgott a konverzió és a fordulatszám hatására sem változott. Igaz ez a többi lapátgeometria kialakítás esetén is látható, ennél a betáplálási helynél a fordulatszám nincs nagy hatással a konverzióra, ami 80 % körüli értéket vett fel. Csak a hosszú szögletes lapátkialakítás esetén látható nagyobb változás (5 %), a többi esetben a 2 % körül, illetve az alatt változik a konverzió a fordulatszám hatására.

A kilépési felülethez legközelebbi betáplálási helyet mutatja be a 12. ábra. Itt az eddigiektől eltérően nem a hosszú szögletes hozta a legrosszabb eredményt, hanem a közepes lekerekített keverőelem, 15-25 % között mozog a konverzió. A többi kialakítás esetén, pedig a minél hosszabb a lapát, annál magasabb a konverzió és annál jobban változik a fordulatszámtól elvet követi.

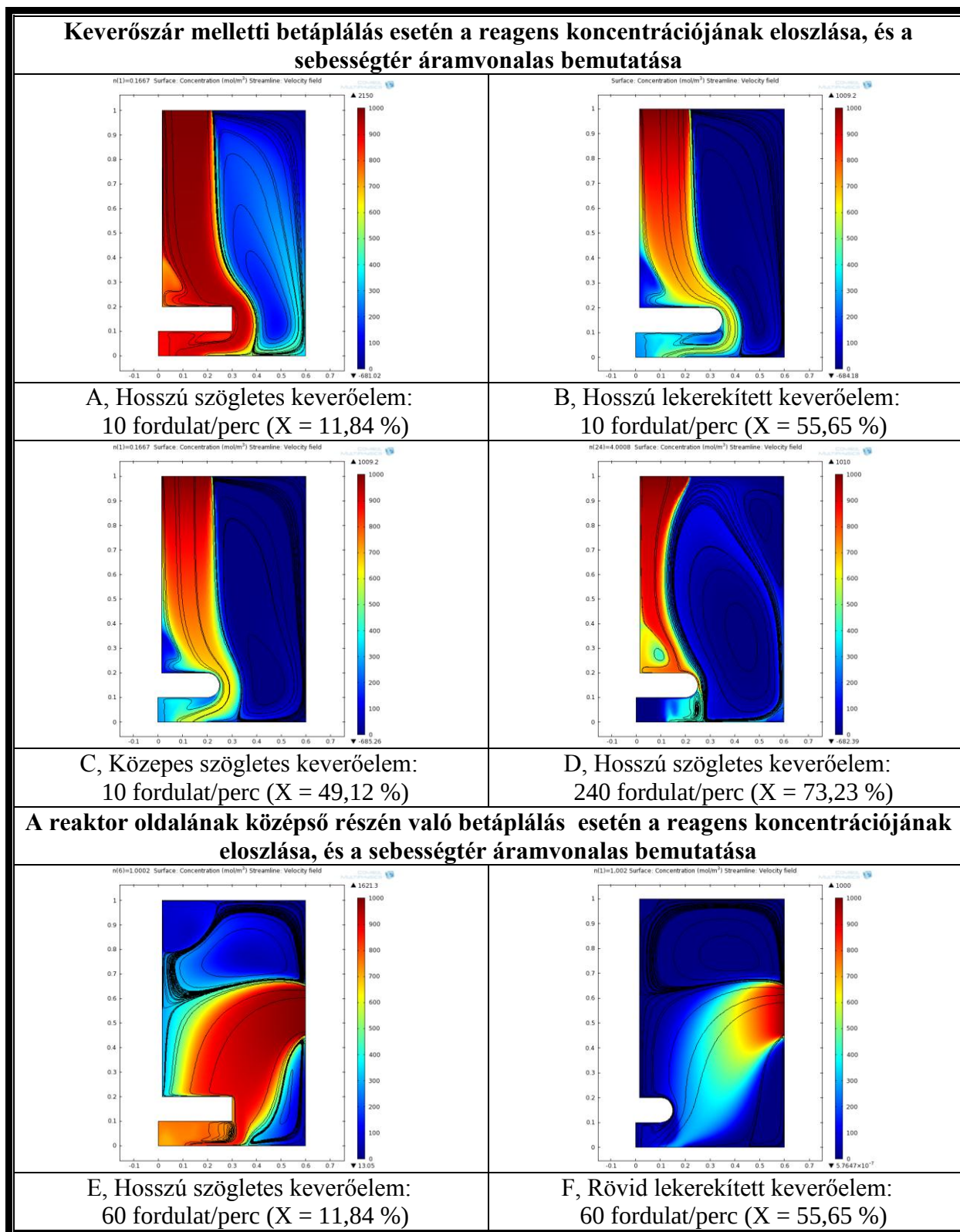


11. ábra: A reaktor oldalának középső részén való betáplálás esetén vizsgált lapátgeometriák konverzió - fordulatszám diagramja



12. ábra: A reaktor oldalának alsó részén való betáplálás esetén vizsgált lapátgeometriák konverzió - fordulatszám diagramja

A következőkben az egyes kialakítások esetén meghatározott stacioner koncentráció eloszlásokat mutatom be, amelyek az előzőekben ismertetett ábrák alapjául szolgáltak. Az „A” és „B” ábrán a 8. ábrán látható hosszú szögletes és hosszú lekerekített lapát kialakítások során kapott nagymértékű konverzió különbségek láthatóak. Jól látható, hogy az „A” kialakítás esetén a betáplált reagens alig 10 %-a reagál el, míg a „B” esetben a kilépésnél már több mint a fele elreagált.



2. táblázat: Lapátgeometriák bemutatása koncentrációprofilok alapján

A két eset közt jól látható, hogy hosszú szögletes keverőelem esetén a reaktortér jobb oldali részében van reagens, a másik esetben viszont jóval több termék van azon a részen. A „C” és „D” ábrán szintén a 8. ábrán látható érdekességet támasztom alá, a fordulatszám hatását ugyanazon keverőelem kialakítás esetén. Látható, hogy magasabb fordulatszámon a betáplált

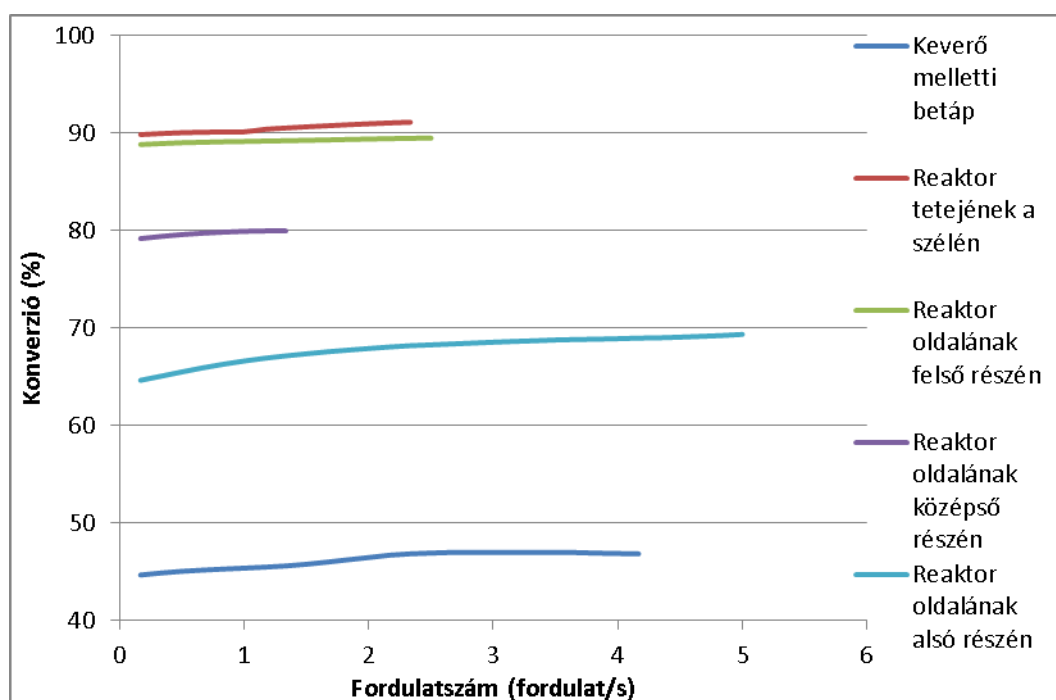
térfogatáram „deformálódik”, ezáltal a termék nagyobb részben tud átalakulni (kék rész). Az utolsó két koncentrációprofil az 11. ábrán látható nagy konverziókülönbséget mutatja be.

Megállapítható, hogy a hosszabb keverőelem esetén a reaktortér kis része van kihasználva, illetve a reagens nagy része a kilépési felületen átalakulás nélkül távozik. Ezzel szemben a rövid keverőelem esetén a betáplált reagens a kilépési felületet el sem érve máris átalakulva távozik a reaktorból.

4.2. Betáplálási helyek vizsgálata

A már bemutatott keverőlapátok esetén megvizsgáltam a betáplálási helyeket is, hogy a keverés és a fordulatszám hogyan hat a konverzióra. A modell ugyanúgy épül fel, mint az előző vizsgálat esetén. A keverési sebességet 10-300 fordulat/perc tartományban vizsgáltam ismét, igaz néhány esetben itt sem értem el ezt a kitűzött maximális fordulatszámot. A $0,01256 \text{ m}^3/\text{s}$ -os betáplálási térfogatáramból a felület nagyságának függvényében meghatároztam minden esetben a betáplálási sebességet és így futtattam a programokat. Vizsgáltam a betáplálás hatását a 6. peremen a keverőszár közvetlen közelében, a 9. peremen a reaktor felső lapjának a szélén, illetve a reaktor oldalán a 16. peremen, a 14. peremen és a 12. peremen.

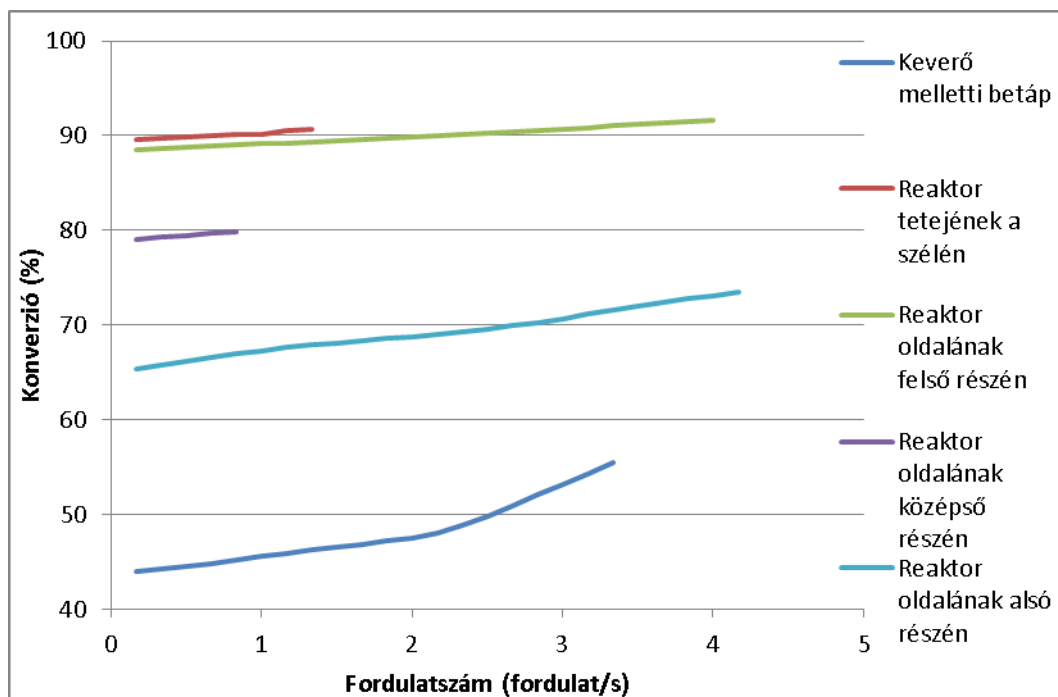
A 13. ábrán megfigyelhető, hogy a rövid lekerekített lapátgeometria esetén a betáplálási helyeknek nagy jelentősége van. Ismét látható, hogy a reaktorban a kilépési felülettől a legtávolabb elhelyezkedő betáplálási felületek eredményezik a legnagyobb konverziókat. A keverőelem fordulatszám változtatása nem befolyásolja jelentősen a konverzió alakulását ebben az esetben.



13. ábra: Rövid lekerekített lapátgeometria esetén a betáplálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja

Valószínűleg a keverőelem azért sem befolyásolja jelentősen a konverziót, mivel keskenyebb, mint a kilépési felület sugara, ezért az áram nem ütközik neki, hanem a keverőelem mellett képes eláramlani, és így kilépni a reaktorból, nem keletkezik visszakeveredés.

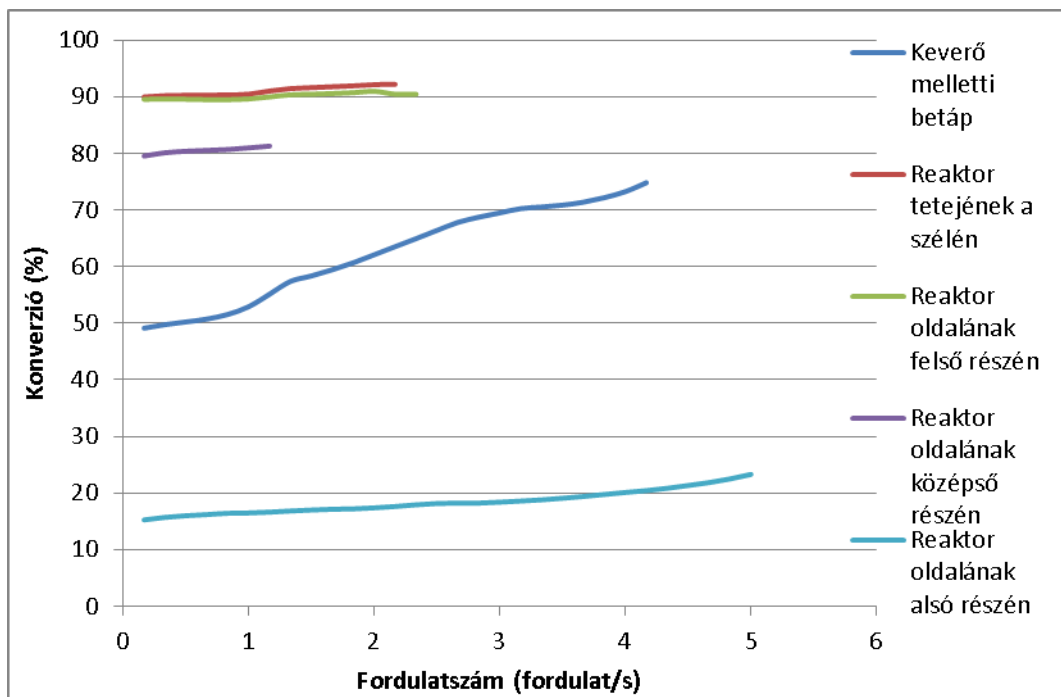
Ha a lapát hosszát nem változtatjuk csak egy lekerekített véget teszünk rá, akkor az eredmények alig változnak. A betáplálási helyek sorrendje ugyanúgy követi egymást, mint a 13. ábrán és a fordulatszámnak hasonló módon gyakorlatilag nincs semmilyen hatással a konverziók alakulására. Ezt valószínűleg a két keverőelem hasonlósága okozza. Itt is a kilépési felülettől legtávolabbi betáplálási felületek eredményezik a legnagyobb konverziót. Ezt az okozhatja, hogy a komponensrészecskéknak több utat kell megtenni, ez nagyobb tartózkodási időt jelent, ami idő alatt a reakció le tud játszódni és így kevesebb reagens, de több termék fog kilépni a reaktorból.



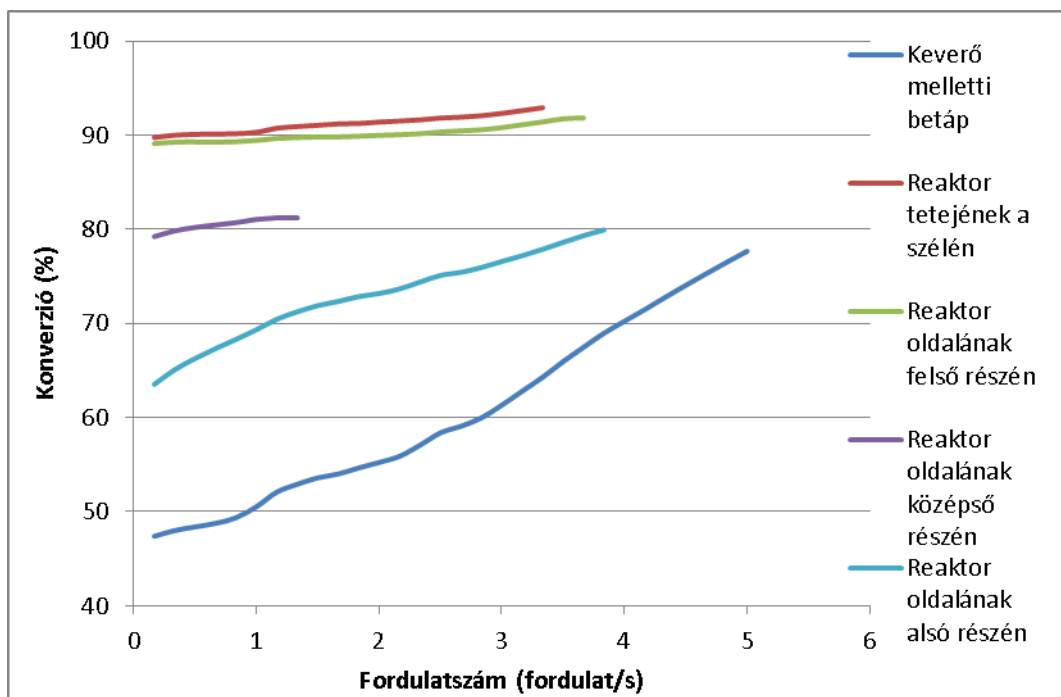
14. ábra: Rövid szögletes lapátgeometria esetén a betáplálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja

A 15. és 16. ábra mutatja be a közepes lekerekített, illetve a közepes szögletes lapátgeometriákat. Ezeknél a lapátoknál már jelentősebb a fordulatszám hatása a konverzió alakulására, a betáplálási helyek pedig még mindig igen jelenősen befolyásolják ezt az értéket. Itt már nem figyelhető meg az az azonosság, mint az előző esetben, hogy a betáplálási helyek ugyanazt a sorrendet veszik fel az ábrán. Például a 15. ábrán a kilépési felülethez a legközelebbi betáplálási hely a lekerekített kialakítás csak a szögletes kialakítás esetén elért konverzió harmadrészét tudta elérni. Itt az állhat az eredmény mögött, hogy a szögletes lapátkialakítás élesebb vége erősebben képes a folyadékot a reaktorban keverni, mint a lekerekített elem.

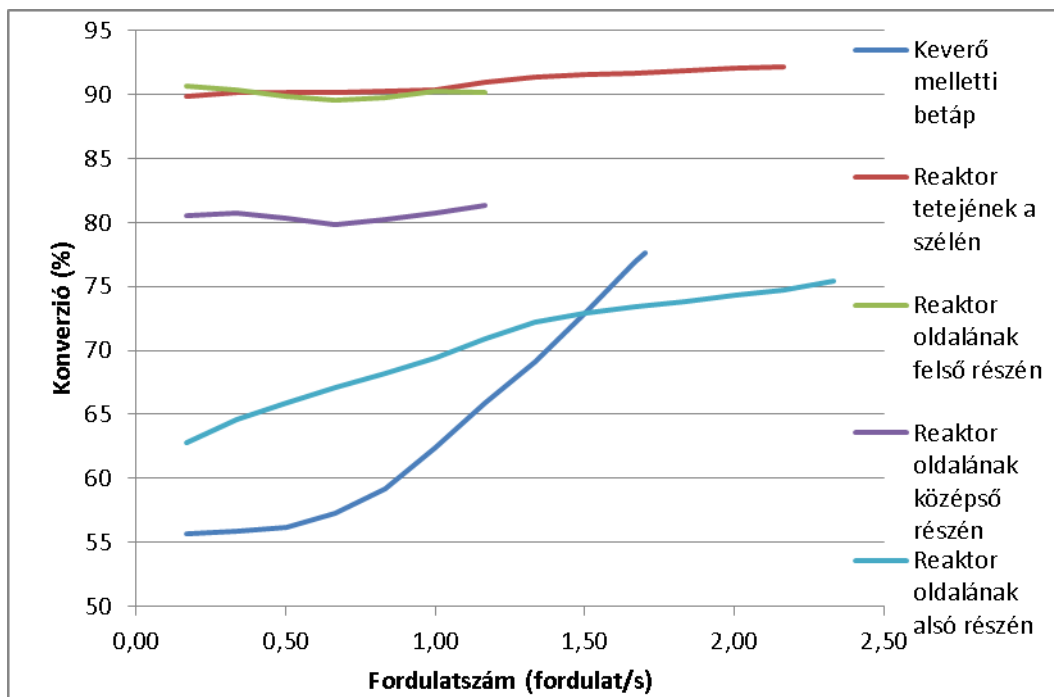
A hosszú lapátgeometria kialakítások maradtak a legvégére, ezek láthatóak a 17. és 18. ábrán. Mindkét ábrán jól megfigyelhető, hogy a keverőszár melletti betáplálás adja a legrosszabb eredményt, feltűnően alacsony ez a konverzióérték a hosszú szögletes kialakítás esetén. Viszont lekerekített kialakítás esetében egy bizonyos fordulatszámot elérve (40-60 fordulat/perc) a konverzió rohamosan emelkedni kezd. A reaktor oldalán való betáplálások esetén nem bír jelentős befolyással a fordulatszám emelése a konverzió növekedésére.



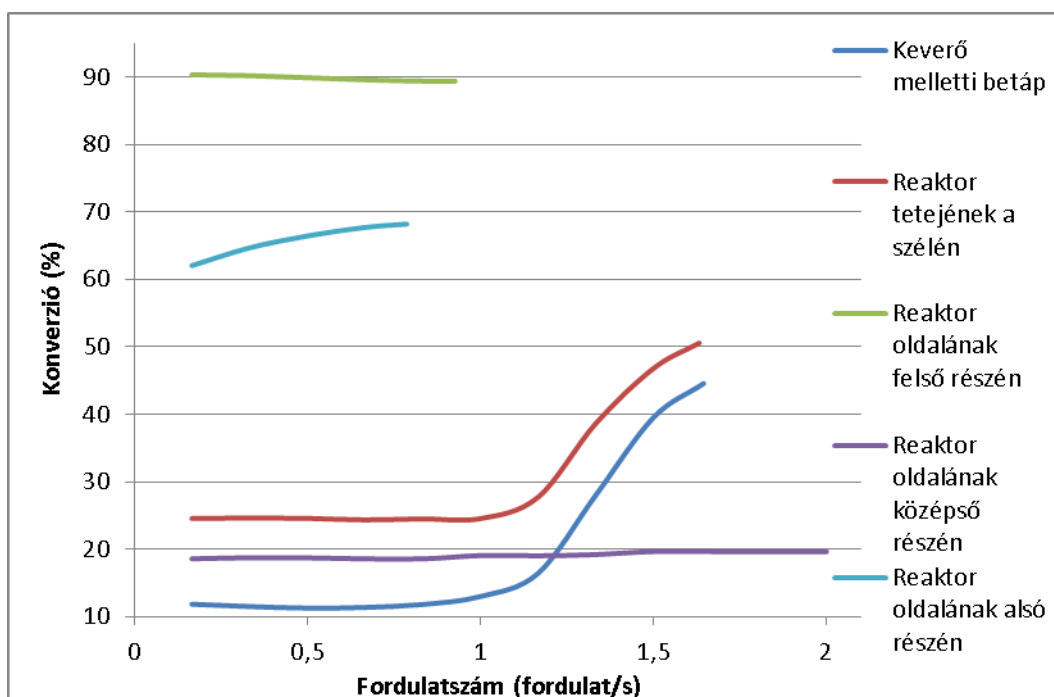
15. ábra: Közepes lekerekített lapátgeometria esetén a betáplálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja



16. ábra: Közepes szögletes lapátgeometria esetén a betáplálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja



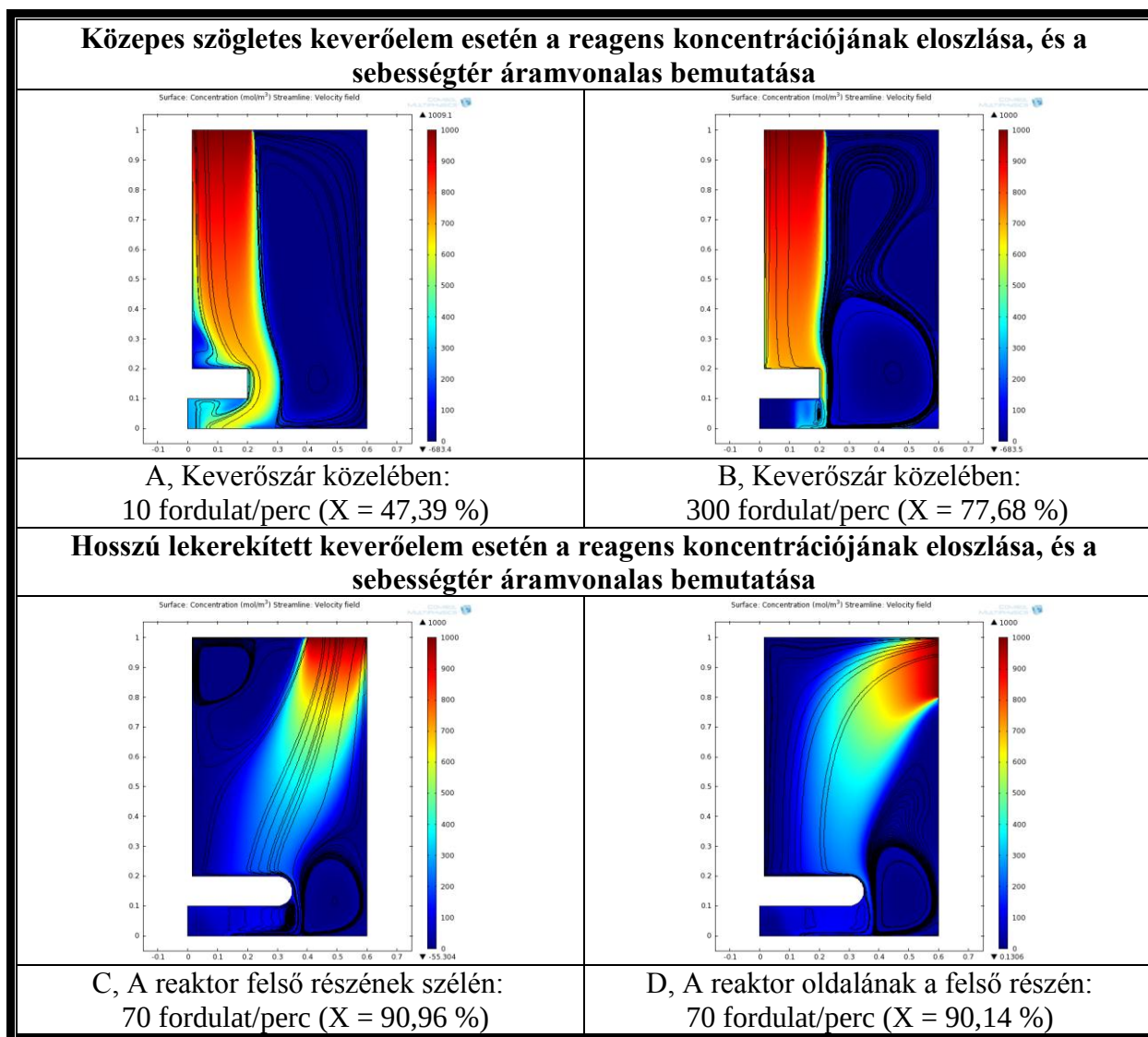
17. ábra: Hosszú lekerekített lapátgeometria esetén a betáplálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja



18. ábra: Hosszú szögletes lapátgeometria esetén a betáplálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja

A vizsgálatok alapján nem lehet egyértelmű összefüggést találni a keverési sebesség és a konverzió között. Látszik, hogy bizonyos betáplálások esetén a fordulatszám növelése növelheti a konverziót, de van, hogy szinte semmilyen hatást nem gyakorol rá, vagy ez a hatás olyan kicsi, hogy gazdaságilag nem érné meg emelni a fordulatszámot. Itt is megfigyelhetők, hogy a kidolgozott modellekkel nem minden esetben lehetett szimulálni a reaktor működését. A modell alkalmazhatósága bővíthető lehet egy a turbulens áramlások számítására alkalmas modellegyenlet beépítésével.

Érdekességképpen a 3. táblázatban szereplő ábrákon láthatók a koncentráció eloszlások a reaktorban néhány kialakítás esetén.

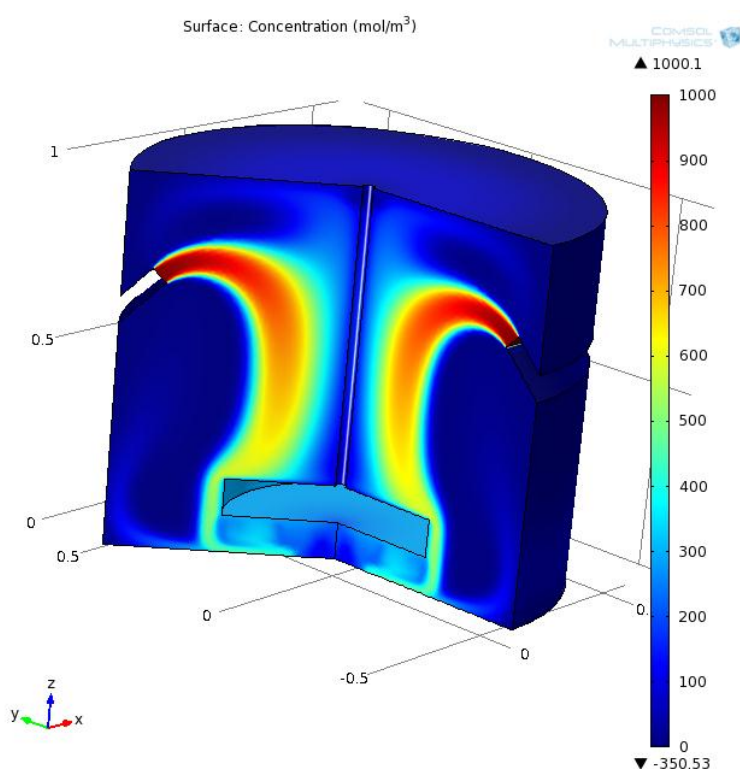


3. táblázat: Betáplálási helyek bemutatása koncentrációprofilok alapján

Látható az „A” és „B” ábrán, hogy a közepes szögletes keverőlapát hogyan befolyásolja az áramlási képet, és ezzel a koncentráció eloszlást is, amiből meghatározható a konverzió. A keverési sebesség növelése esetén a betáplálási áram egyre inkább a keverőelem közelébe szorul, ezzel teret adva a reakció végbemenetelének a reaktor többi részében. Az „A” ábrán az is észlelhető, hogy a reagens alacsony fordulatszám esetén, a keverőlapátot mintha „kikerülné” így lépve ki átalakulatlanul a reaktorból, rontva a konverziót. A „C” és „D” ábrán pedig egy konverzióértékben a fordulatszám növelésére is alig eltérő esetnek a koncentrációprofilját mutatnám be. Jól megfigyelhető az, amire már hivatkoztunk korábban néhány esetben, hogy a reaktor felső lapjának a szélén és a reaktor oldalának a felső részén való betáplálás mennyire hasonló. A reaktor körülbelül ugyanakkor térrésze van kihasználva mindkét esetben, a reaktor fala és a keverőelem, illetve a reaktor felső részén a keverőszár mellett is ugyanúgy kialakul mindkét betáplálás esetén egy-egy hasonló kinézetű örvény.

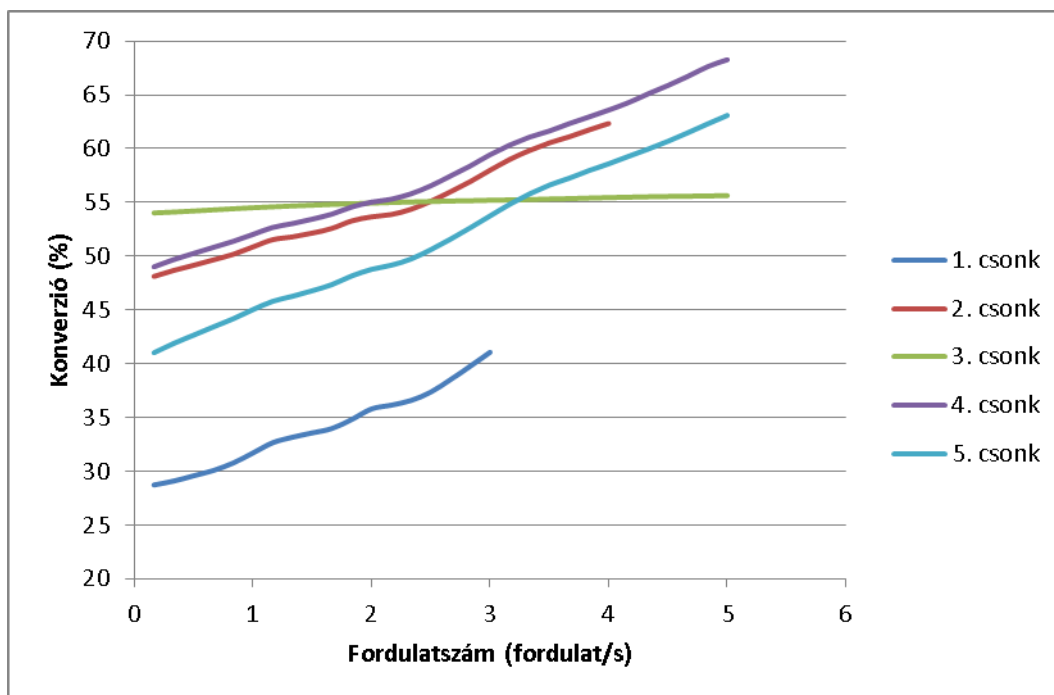
4.3. Injektálási helyek vizsgálata

Ismét mindegyik, a lekerekített és a szögletes keverőlapátokat is megvizsgáltam, ám most nem a reaktor felületén táplálom be az anyagot, hanem injektálási csonkokat helyezek el öt helyen a reaktorban. Ha a modellt három dimenzióban készítettem volna el, akkor ezek a csonkok csak, mint egy cső nyúlnának be a reaktorba, ám mivel most két dimenzióban dolgozunk, így az egész reaktorban, mint egy sáv fog megjelenni a csonk. A 19. ábrán látható ez a gyakorlatban is. A reaktorban, körben végig jelen van az injektálási csonk, így nem csak egy pontban történik a betáplálás, hanem egy sávban. Ezt a modell kétdimenziós leképezése okozza, ha a modellt elkészítjük három dimenzióban a probléma kiküszöbölésre kerül. A térfogatáram ismét a $0,01256 \text{ m}^3/\text{s}$ volt, de mivel a felület változott, így új betáplálási sebességeket számoltam ki.

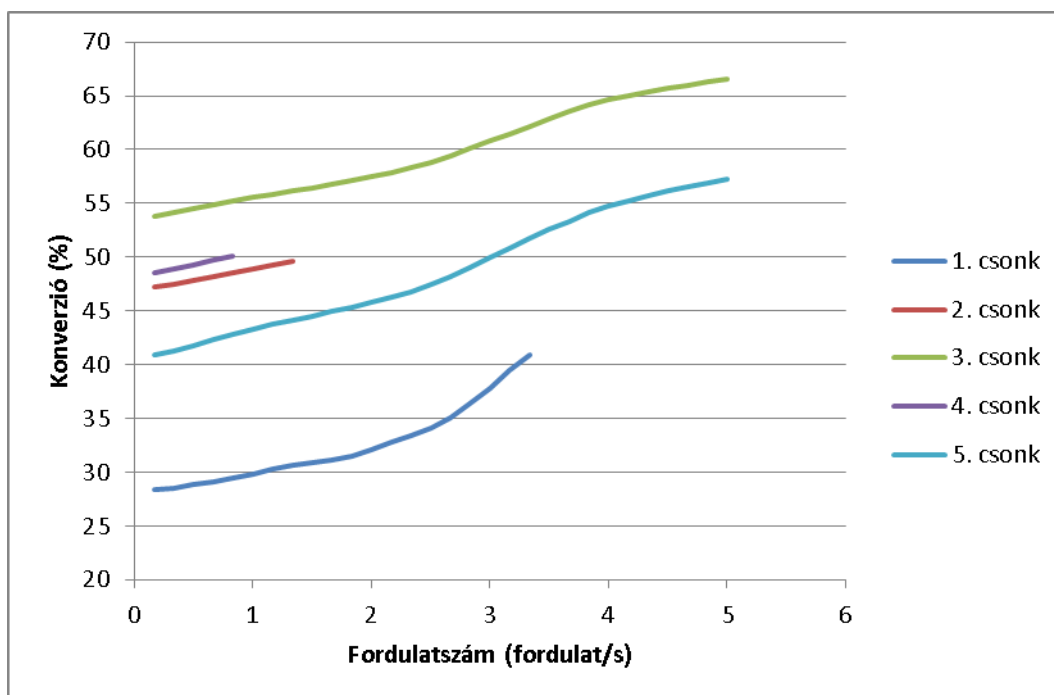


19. ábra: Injektálási csonkok bemutatása három dimenzióban

Először a rövid lekerekített és a rövid szögletes keverőlapát kialakításokat vizsgáltam meg. A keverőszárhoz legközelebb eső injektálási csonk mindkét esetben a legrosszabb konverzióértéket adja. A 21. ábrán látható hogy a 3. csonk kivételével mindegyik injektálási csonk monoton nő, viszont e csonk esetén szinte nincs változás a konverzióban a fordulatszám hatására. Ez az eltérő érték a szögletes kialakítás esetében már nem található meg. Alacsony fordulatszámokon az injektálási csonkokhoz tartozó konverzióértékek sorrendje ugyanaz, ám a már említett „anomália” miatt ez magasabb fordulatszámokon változik.

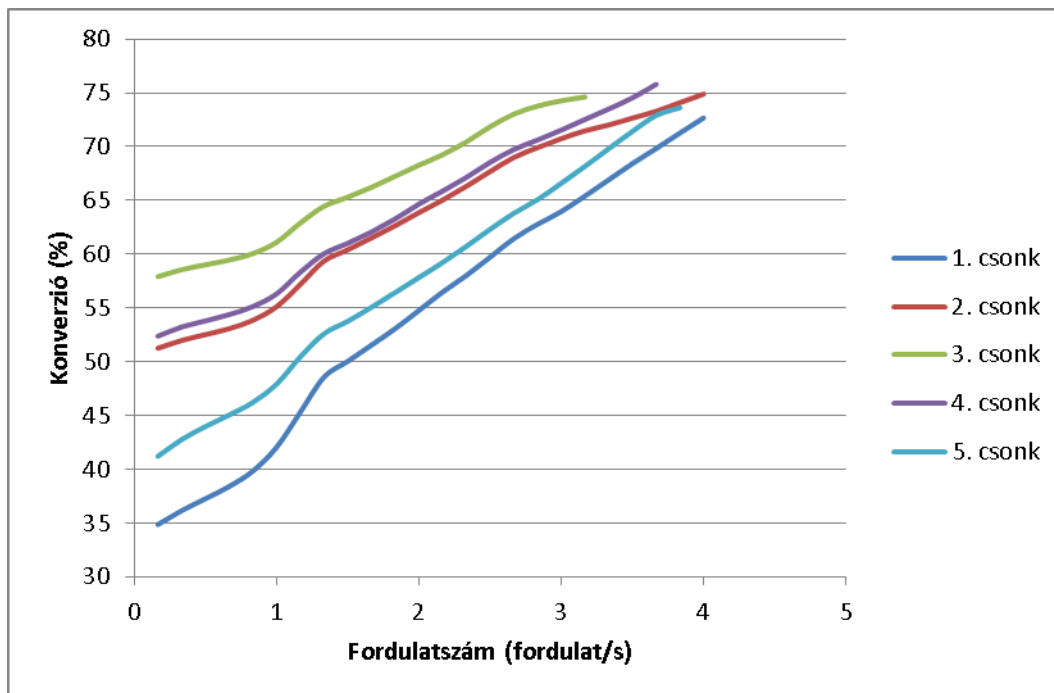


20. ábra: Rövid lekerekített keverőelem esetén a beinjektálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja

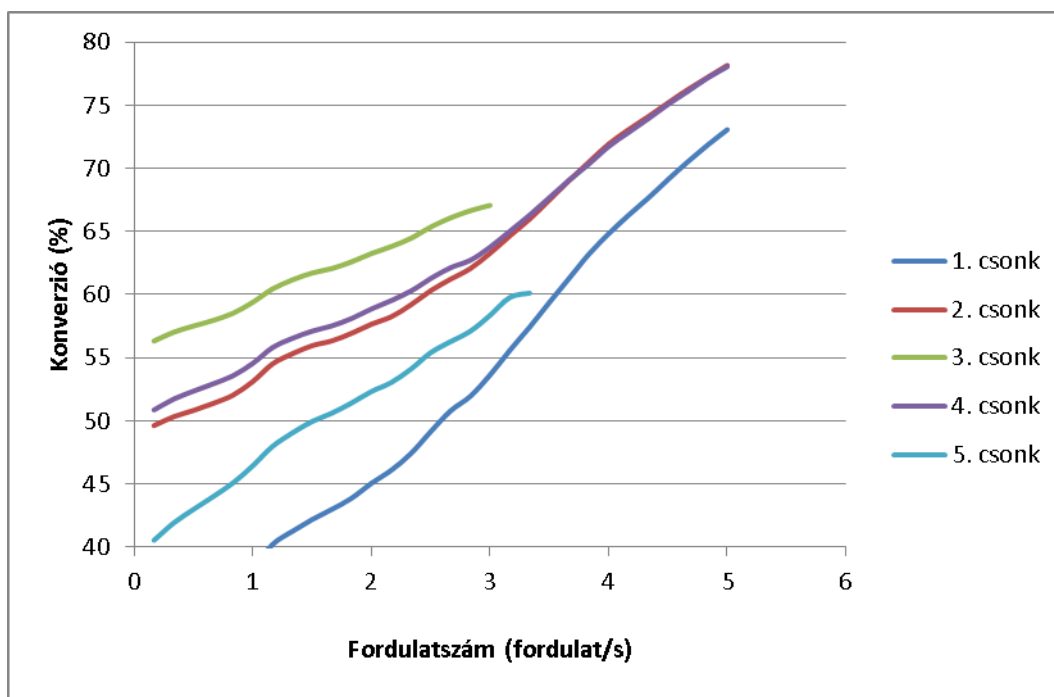


21. ábra: Rövid szögletes keverőelem esetén a beinjektálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja

A 23. és 24. ábrán, vagyis a közepes méretű lekerekített és szögletes lapátgeometriák esetében is megfigyelhető az a hasonlóság, amit már a rövid lapátgeometriáknál észrevehettünk. A beinjektálási csomkok konverzióértékei alapján felvett görbék is meghatározott sorban követik egymást mindkét esetben. A keverőszár melletti injektálási csomk ismét a legrosszabb értékeket adja számunkra, míg a legjobbat a kilépési felülettől legtávolabbi csomk. Ezt ismét az okozhatja, hogy innen kell az térfogat elemeknek a legtöbb utat megtennie a kilépéshez, a reakciónak van ideje lejátszódni, így több termék és kevesebb reagens lesz jelen a kilépési felületen.



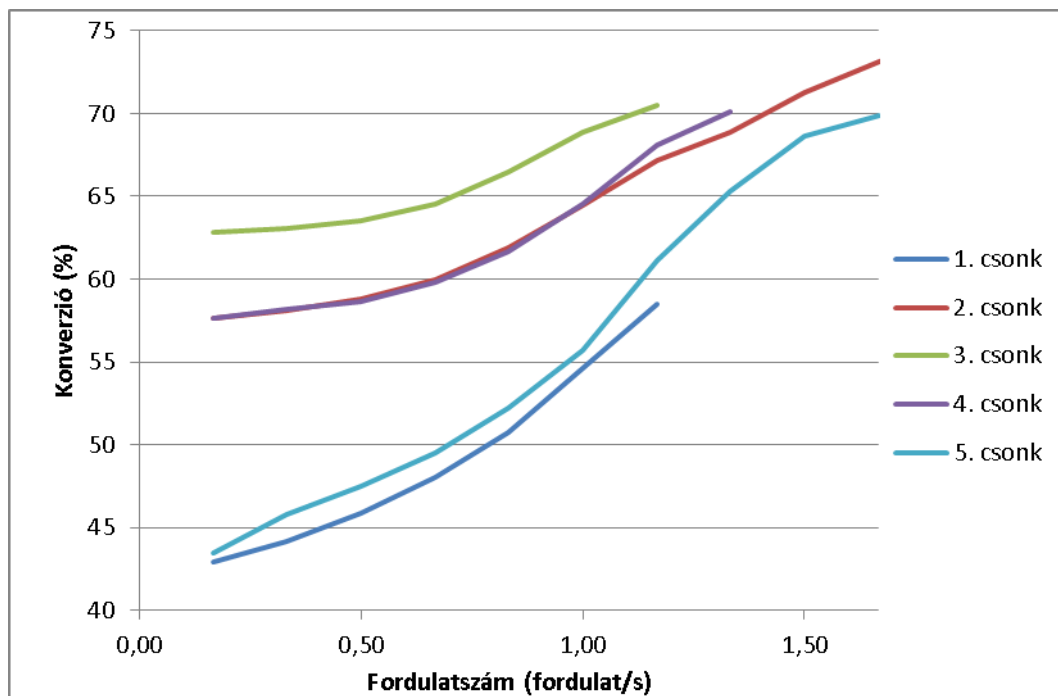
22. ábra: Közepes lekerekített keverőelem esetén a beinjektálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja



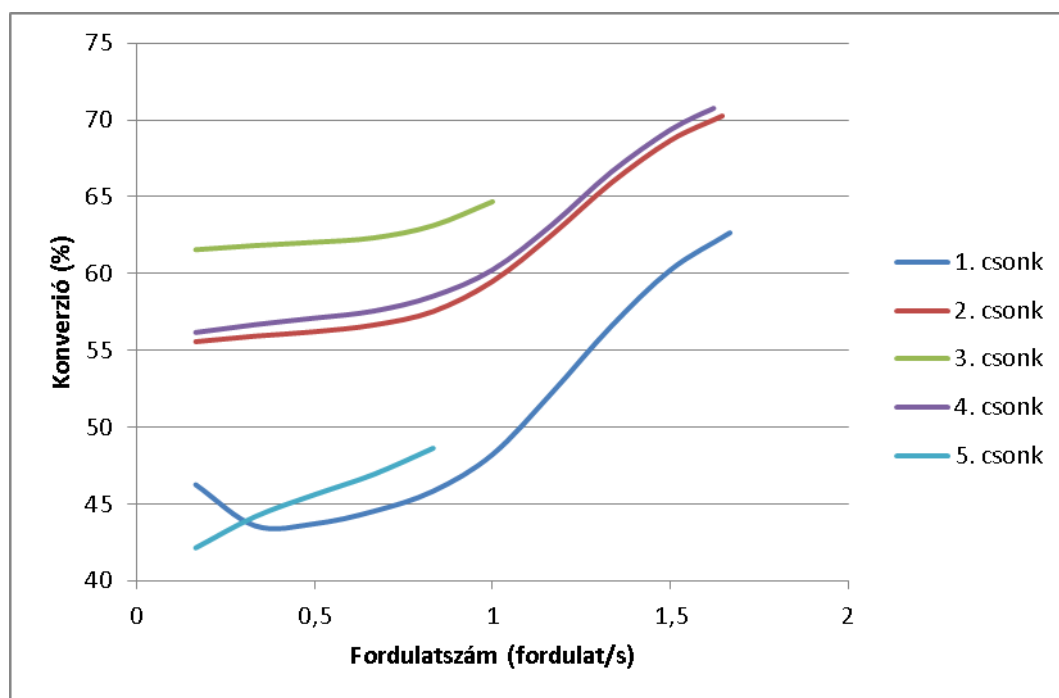
23. ábra: Közepes szögletes keverőelem esetén a beinjektálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja

Végül megvizsgáltam a hosszú lekerekített és a hosszú szögletes lapátgeometriát is, ezek eredménye a 25., 26. ábrán látható. nem okozott egyik eredmény sem meglepetést, mivel itt is monoton növekedést tapasztalunk a fordulatszám függvényében. Az injektálási csontok által eredményezett konverzióalakulás is a már eddigiekben ismertett sorrendet tükrözi. A

szokásos módon a legkisebb konverziót a keverőszárhoz legközelebb található csontk eredményezi, a legnagyobbat a kilépési felülettől legtávolabb elhelyezkedő 3. csontk, a 2. és 4. csontk ismét nagyon közeli eredményeket ad egymáshoz.



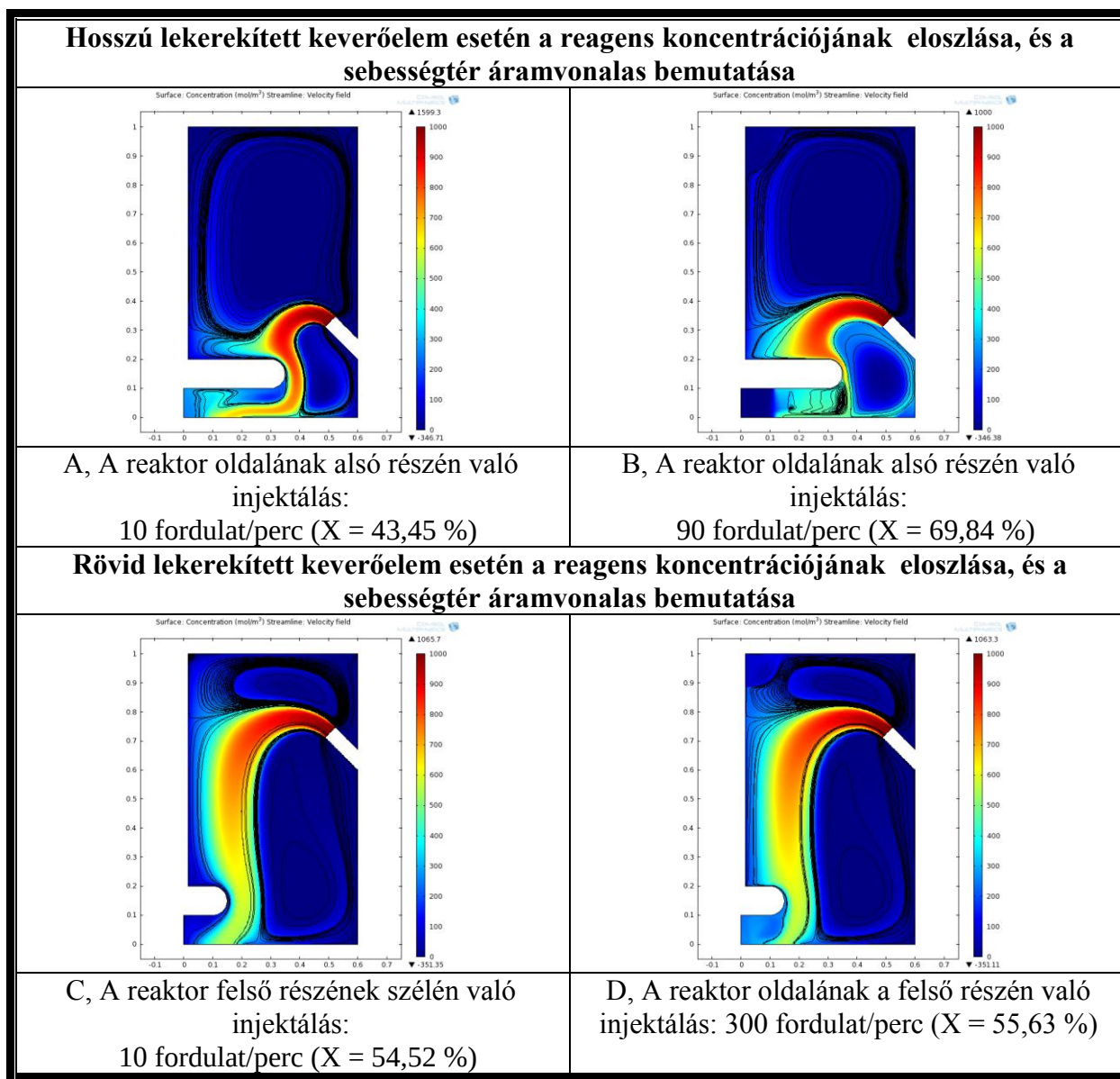
24. ábra: Hosszú lekerekített keverőelem esetén a beinjektálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja



25. ábra: Hosszú szögletes keverőelem esetén a beinjektálási helyek konverzió - fordulatszám diagramja

Az injektálási vizsgálatok után kijelenthetjük, hogy amennyiben egy reaktorba anyagot egy csontkon keresztül injektálunk, akkor a fordulatszám növekedésével monoton növekvő konverzió eloszlást fogunk kapni, és a legjobb eredményt akkor kapjuk, ha a kilépési felülettől legtávolabb helyezzük el a beinjektálási csontkot, hogy a reagensnek legyen ideje

átalakulni a kilépési felülethez vezető úton. Azt nem szabad elfelejteni, hogy a vizsgálatainkban egy elsőrendű reakciót elemeztünk csak, így érdemes lenne kiterjeszteni a vizsgálatainkat más reakciórendszerek esetére, illetve más a reaktor teljesítőképességét jellemző mennyiség alakulására is (pl. szelektivitás párhuzamos reakciókat tartalmazó reakciórendszerek esetén).



4. táblázat: Injektálási helyek vizsgálat koncentrációprofilok alapján

Ismét összehasonlítok egy-egy eset két szélsőséges pontjának a koncentrációprofilját. „A” és „B” esetben jól látható, hogy a keverés sebességének növelésével az injektálási csomák és a keverőelem között létrehozható egy olyan örvény, mely az anyagot nem engedi egyből, átalakulás nélkül a kilépési felülethez. Az „A” esetben viszont a reagens több mint fele átalakulatlanul távozik a reaktorból. A „C” és „D” esetekben látható, hogy van olyan injektálási csomák és keverőelem kialakítás, ahol a keverési sebesség harmincszorosra növelése sem okoz jelentős változást a konverzióban.

4.4. A konverzió és a tartózkodási idő kapcsolata

Az áramlástani problémák vizsgálata kiemelt jelentőségű az iparban, hiszen ha egy reaktor áramlástani szempontból nem megfelelően működik, az általában magával vonja sok más fontos üzemelési paraméter (pl.: konverzió) kedvezőtlen változását is. Ilyen jellegű problémák feltárására és számszerűsítésére, számos vizsgálati mód közül az egyik legfontosabb a tartózkodási idő eloszlás-sűrűség függvény vizsgálata. Ezt a rendszer belső hidrodinamikai tulajdonságait jellemző válaszfüggvényt a következő módon határoztam meg. A modellem lamináris részének stacioner körülmények között való lefuttatása után, létrehoztam egy négyszögfüggvényt, ami 10 és 10.1 másodperc között táplál be a reaktorba 1000 mol/m^3 koncentrációval anyagot. A komponensmérleg forrás tagját kivettem a modellből, mivel itt annak a meghatározása volt a cél, hogy a betáplált anyag milyen időpillanatokban milyen mennyiségben mosódik ki a reaktorból. Ehhez a komponensmérleget dinamikus modellé alakítottam, s oldottam meg 0 és 50 másodperc között 0,1 másodperces szimulációs lépésközzel. Ezután a reaktorból távozó áramban számítottam a beinjektált anyag átlagkoncentrációját, amiből az alábbi összefüggések alapján meghatároztam a reaktor tartózkodási idő eloszlás-sűrűségfüggvényét az adott kialakítás esetén. A számított átlagkoncentrációk integrálásával (feltételezve, hogy a térfogatáram nem változik):

$$c_{int,2} = \frac{c_1 + c_2}{2} \cdot (t_2 - t_1) + c_{int,1} \quad (22)$$

A reaktorba beinjektált anyag koncentrációja adódik. Ezután határoztam meg a tartózkodási idő eloszlás-sűrűség függvényt:

$$E(t)_2 = t_2 \cdot c_{bs} \quad (23)$$

Következhetett a tartózkodási idő eloszlás függvény számítása:

$$F(t)_2 = \frac{E(t)_1 + E(t)_2}{2} \cdot (t_2 - t_1) + F(t)_1 \quad (24)$$

Végül meghatároztuk az idő és a tartózkodási eloszlás-sűrűség függvény szorzatának integrálértékeit:

$$(E \cdot t)_{int,2} = \frac{(E \cdot t)_1 + (E \cdot t)_2}{2} \cdot (t_2 - t_1) + (E \cdot t)_{int,1} \quad (25)$$

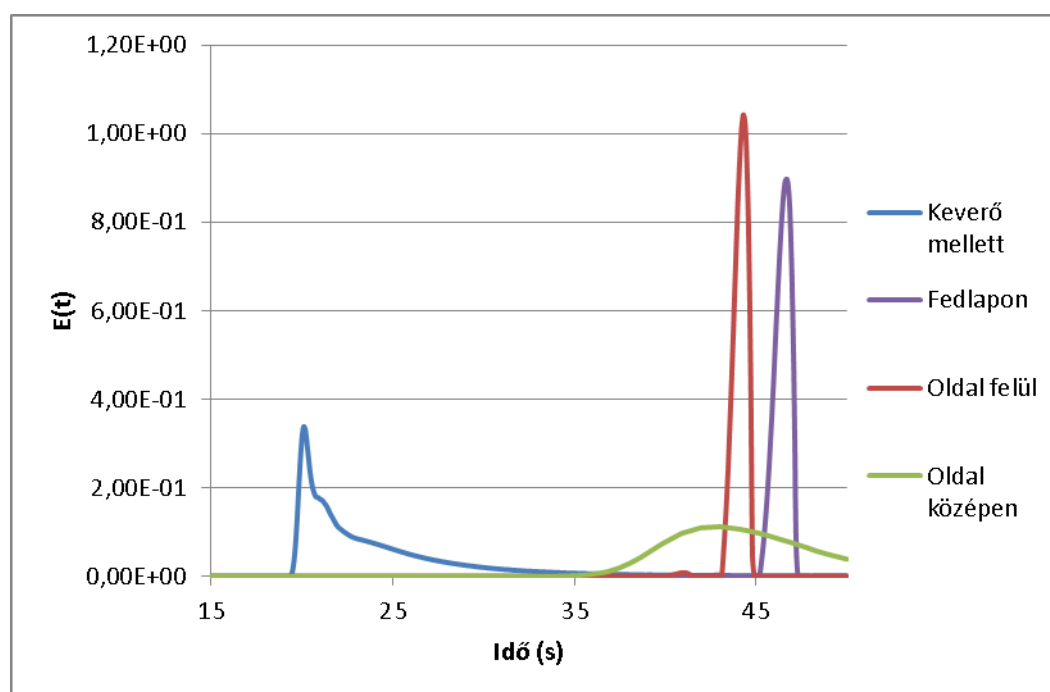
Az integrál értéke adja meg a reaktorban az átlagos tartózkodási időt.

Dolgozatom jelen fejezete arra próbál felvilágosítást adni, hogy az eddig bemutatott diagramokon a nem várt eredmények milyen okból születtek meg. Vegyük először a 15. ábrán látottakat. A konverzió a rövid lekerekített lapátgeometria esetén a betáplálási helytől függően jelentős mértékben eltért. Ezekben a betáplálási pontokon és lapátgeometria esetén a 26. ábrán látható tartózkodási időket kaptam. Jól látható a görbék maximumának megjelenése az idő tengelyen. Annak érdekében, hogy ezt láthassuk számszerűen is a 5. táblázatban feltüntettem a tartózkodási idő értékeit.

	Tartózkodási idő (s)	Maximálisan elérhető konverzió (%)
Keverő mellett	24,07	47,0
Reaktor felső részének a szélén	46,43	91,1
Reaktor oldalának a felső részén	44,11	89,5
Reaktor oldalának a középső részén	43,59	80,0

5. táblázat: Rövid lapátgeometria esetén a betáplálások tartózkodási idő és konverzió értékei

A 6. táblázatból is látható, hogy a tartózkodási idő jelentősen befolyásolja a maximálisan elérhető konverzió értékeket. Minél kisebb a tartózkodási idők közti különbség annál kisebb az elérhető konverziók közti különbség. Megfigyelhető még az is, hogy a tartózkodási idővel párhuzamosan nő a konverzió is.

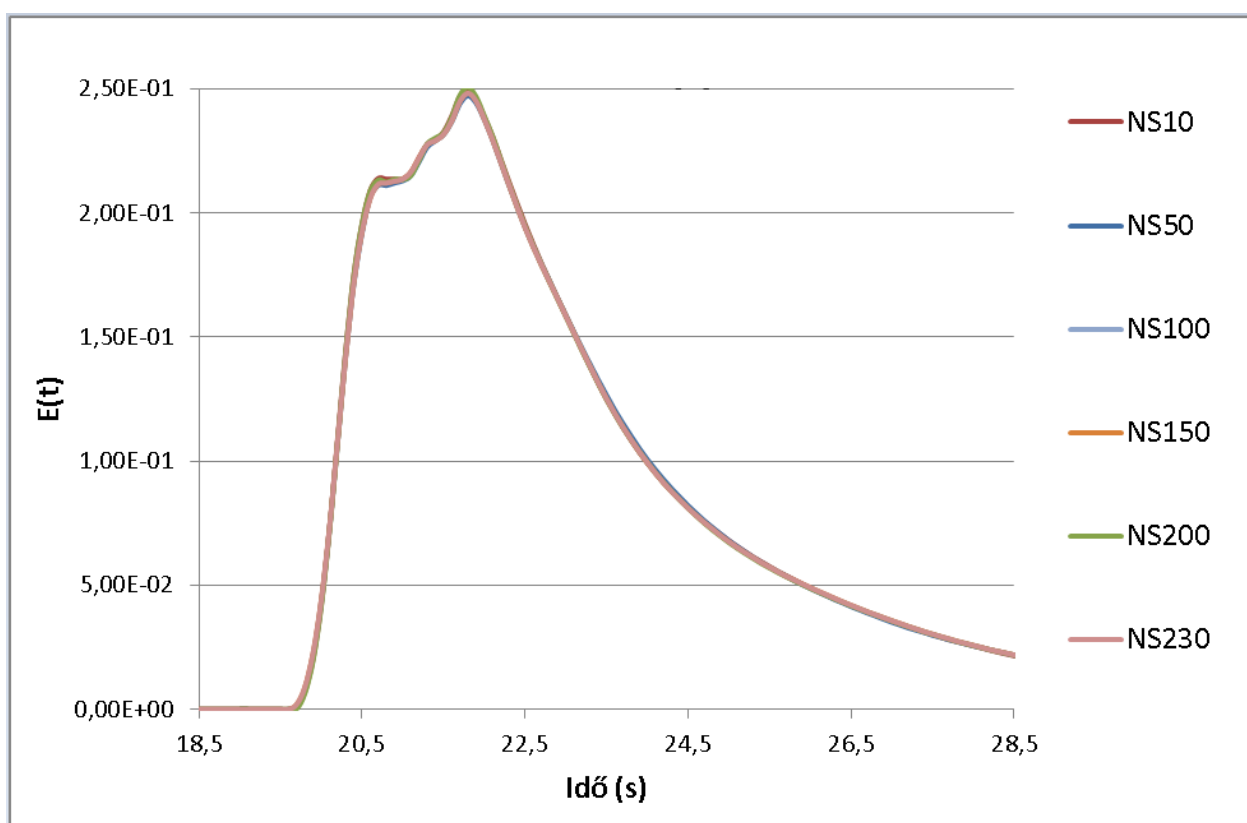


26. ábra: 15. ábrához tartozó tartózkodási idő sűrűség eloszlás függvény

Következőnek pedig szeretném a 14. ábra egyik görbét kielemezni, hogy miért is nem változnak a konverzióértékek a fordulatszám növekedésével. Jól látható mind a 6. táblázatban, mind a 27. ábrán, hogy sem a tartózkodási idő, sem a maximálisan elérhető konverzió nem nőtt. Így már érthető, hogy az akkor bemutatott ábrán miért van egy közel konstans értéken mozgó vízszintes vonal a konverzió eloszlás helyén. Tehát jól látszik, hogy a kilépési felületen számolt konverzió szoros kapcsolatban van az adott lapátgeometria és betáplálás, beinjektálás kialakításával.

Fordulatszám (1/perc)	Tartózkodási idő (s)	Maximális konverzió (%)
10	23,13	44,69
50	23,15	45,3
100	23,14	46,01
150	23,13	46,93
200	23,14	46,99
230	23,15	46,92

6. táblázat: Rövid szögletes lapátgeometria esetén a keverőszár melletti betáplálás tartózkodási idő és konverzióértékei



27. ábra: 8. ábrához tartozó tartózkodási idő sűrűség eloszlás függvény

5. Összefoglalás és konklúzió

Dolgozatomban az ide kapcsolódó irodalom ismertetése után, implementáltam egy kevert reaktor modellt a CFD környezetbe, kétdimenziós axiális szimmetriában. A különböző lapátgeometriák vizsgálata után, elvégeztem a betáplálási és beinjektálási helyek vizsgálatát, majd alátámasztottam az eredményeket a tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvény meghatározásával.

Az irodalmi részben bemutatott tanulmányok, és cikkek növekvő száma alátámasztja a numerikus áramlástani módszerek alkalmazhatóságát és egyre nagyobb térhódítását mind tervezési, mind üzemeltetési viszonylatban is. A kevert berendezések működését jobban megérthetjük a megfelelő modellek felírásával és alkalmazásával.

A gyakorlati rész első részében megvizsgáltam három különböző hosszúságú lekerekített, és három szögletes keverőelemet. A tapasztalatok szerint a keverőelemek és a különböző keverési sebességek sokszor jelentős hatással bírnak a konverzió változására, de egyértelmű összefüggést egyelőre nem lehetett megállapítani. Viszont azt már itt észrevettük, hogy bizonyos esetekben kialakult a lapát által keltett turbulencia, aminek megoldására az alkalmazott lamináris modell már nem volt képes.

Ezután megvizsgáltam öt db, a reaktor falán elhelyezett betáplálási helyet és öt darab beinjektálási csonkot a már vizsgált keverőelemek esetén. A keverés sebességének hatását vizsgáltam a reaktor működésére. Mindent összevetve levonható olyan jellegű következtetés, hogy a keverősárhoz közel nem érdemes betáplálni reagenst, viszont ha a betáplálás a lehető legtávolabb van a kilépési ponttól, akkor tudjuk elérni a legnagyobb konverziót. A tartózkodási idő eloszlás-sűrűség függvényt is meghatároztam néhány érdekesnek tűnő esetben, ezzel választ adva a konverzió alakulásában tapasztalt anomáliáknak.

A tudományterület még rengeteg kutatási lehetőséget rejt magában. További céljaim közé tartozik ennek a vizsgálatnak turbulens tartományban való elvégzése, mivel ez itt nem történt meg, de látható volt, hogy sok esetben a feldolgozott eredmények hiányosak voltak. Miután ez megtörtént egy olyan algoritmus kidolgozásra a célom, ami a betáplálás helyét optimalizálja. Ennek könnyebb alkalmazhatósága érdekében szeretnék készíteni egy kezelői felületet, ahol a felhasználó tetszőleges geometriát, reakciókinetikát adhat meg és eredményként megkapja, hogy a legnagyobb konverzió eléréshez melyik reagenst a reaktor mely pontján kell betáplálnia. Legvégül pedig az eddig alkalmazott modellt, egy 3D-ban kialakított kevert berendezések áramlási képének számítására alkalmas modellel váltanám le, hogy még megbízhatóbb számítások elvégzése is lehetővé váljon.

6. Melléklet

Név	Meghatározás	Mértékegység
ρ	a sűrűség	[kg/m ³]
u	a sebességvektor	[m/s]
η	viszkozitás	[Pas]
P	nyomás	[Pa]
k	reakciókinetikai állandó	1/s
D_i	diffúziós koefficiens	[mol/m ³ s]
R_i	forrástag	[W/m ³]
N	fordulatszám	[rpm]
∇	nabla - differenciáloperátor	
F	erővektor	N
c_i	i komponens koncentrációja	mol/dm ³
$c_{0,i}$	i komponens kezdeti koncentrációja	mol/dm ³

7. Irodalomjegyzék

- [1] Veress Árpád: *Bevezetés az áramlástan numerikus módszereibe*, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, egyetemi jegyzet, Budapest, 2002
- [2] http://www.cfd-online.com/Wiki/CFD_quotations
- [3] Vivek V. Ranade, *Computational flow modeling for chemical reactor engineering*, Academic Press, 2002
- [3] Fonyó Zs. , Fábry Gy. *Vegyipari művelettani alapismeretek* Nemzeti Tankönyvkiadó, 2004
- [4] <http://www.cd-adapco.com/index2.html>
- [5] <http://www.flow3d.com/index.html>
- [6] <http://www.comsol.com>
- [7] R. W. Lewis, P. Nithiarasu and K. N. Seetharamu, *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*, John Wiley & Sons, Ltd ISBNs: 0-470- 84788-3 (HB); 0-470-84789-1 (PB)]
- [8] www.intel.com
- [9] www.sciencedirect.com
- [10] www.nbi.dk/~lautrup/continuum/figures/index.html
- [11] Angus, S., et al.: *International Thermodynamic Table of the Fluid State – 3 Carbondioxide*, IUPAC, 3 (1976)
- [12] Kuzmin, Alexander: *Computational Fluid Dynamics 2010*
- [13] Levenspiel, O., *Chemical Reaction Engineering*, 3rd ed., John Wiley & Sons, New York 1999
- [14] A. Milewska, E.J. Molga: CFD simulation of accidents in industrial batch stirred tank reactors *Chemcal Engineering science* 2007., 62, 4920-4925
- [15] A. Milewska, E.J. Molga: Safety aspects in modelling and operating of batch and semibatch stirred tank chemical reactors *Chemcal Engineering Research and Design* 2010., 88., 304-319
- [16] Bakker, A., R. LaRoche, *Flow and Mixing with Kenics Static Mixers*, Cray Channels, Volume 15, Numer 3, p 25-28, 1993
- [17] Bakker A. and E. M. Marshall, *Laminar Mixing with Kenics In-Line Mixers*, Fluent Users Group Meeting Proceedings, p. 126-146, October 13-15, Burlington, Vermont, 1992
- [18] Bakker A. and J. B. Fasano, *Time dependent, Turbulent Mixing and Chemical Reaction in Stirred Tanks*, Annual AIChE Meeting. November 1993, St. Louis, Missouri. AIChE Symposium Series 299, Volume 90, 1993, p. 71-78, 1993.
- [19] Bourne, J.R., F. Kozicki, and P. Rys, *Mixing and Fast Chemical Reaction - I; Test Reactions to Determine Segregation*, Chem. Eng. Sci., 36(10), p. 1643, 1981.
- [20] Middleton, J.C., F. Pierce, and P. M. Lynch, *Computations of Flow Fields and Complex Reaction Yield in Turbulent Stirred Reactors and Comparison with Experimental Data*, Chem. Eng. Res. Des. 64, p. 18-21, January 1986.
- [21] Tipnis, S. K., W. R. Penney, J. B. Fasano, *An Experimental Investigation to Determine a Scale-Up Method for Fast Competitive Parallel Reactions in Agitated Vessels*, AIChE Annual Meeting, St. Louis, MO, November 1993.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet fejezem ki Dr. Chován Tibor egyetemi docensnek a munka során nyújtott szakmai tanácsokért.

Megköszönöm Dr. Varga Tamásnak azt a rengeteg munkát, türelmét, tanácsát amivel segített a dolgozat elkészítésében.

Szeretnék köszönetet mondani Egedy Attilának, a sokszori iránymutatásáért, szakmai tanácsáért, amit nyújtott a dolgozat megírása közben.

Szeretném megköszönni a Vegyészmérnöki és Anyagtudományok Doktori Iskolájának folyamatmérnöki hallgatóinak, azt a szintén sok segítséget, és támogatást, amivel elláttak, mialatt ez a dolgozat készült.