# ХИМИКОТЕХНОЛОГИЧЕН И МЕТАЛУРГИЧЕН УНИВЕРСИТЕТ СОФИЯ

ФАКУЛТЕТ ПО ХИМИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ

Катедра: "Техническа механика"

# ДИПЛОМНА РАБОТА

ТЕМА: "Числено (CFD) и експериментално изследване на двуфазни барботажни колонни реактори "

ОБРАЗОВАТЕЛНО КВАЛИФИКАЦИОННА СТЕПЕН: Магистър

Ръководител на катедра: доц. д-р. инж. А. Александров

(.....)

Научен ръководители: доц. д-р. инж. В. Илиев

(.....)

гл. ас. инж. Д. Мутафчиева (.....)

Дипломант: Валентин Пламенов Чернев, фак. № Мх-0677

(.....)

София, ноември, 2014 год.

Приложение 2

## ХИМИКОТЕХНОЛОГИЧЕН И МЕТАЛУРГИЧЕН УНИВЕРСИТЕТ – СОФИЯ

Факултет: ФХТ

Дата на задаване: 4.XI.2014 г.

Катедра: Приложна механика

Утвърждавам,

Ръководител на катедра: доц. А. Александров

/...../

## ЗАДАНИЕ

за изработване на дипломна работа

на студента: Валентин Пламенов Чернев, фак. № Мх-0677

специалност/изборен модул: "CAD/CAE в химичните технологии"

1. Тема: "Числено (CFD) и експериментално изследване на двуфазни барботажни колонни реактори".

2. Изходни данни: Чертеж на барботажна колона, свойства на материалите от "Properties of Gases and Liquids, Брус П. Полинг, McGraw-Hill 2001" и ANSYS CFX License.

3. Съдържание на дипломната работа.

3.1. Увод, цел и задачи.

3.2. Литературен обзор за периода от 1995 до 2014 г. върху експериментално изследване, математично моделиране и компютърна симулация на процесите в барботажни колони.

3.3. Обекти на изследване: двуфазен барботажен колонен реактор за вода-въздух.

3.4. Методи за изследване /изпитване/: Компютърна симулация и валидиране посдредством лабораторни експерименти.

3.5. Експериментални резултати.

3.6. Обсъждане на експерименталните резултати, включително графики и таблици.

Консултант: гл. ас. Д. Мутафчиева

Научен ръководител: доц. В. Илиев

/

/

/

/

# Съдържание

1.	Увод		4	
2.	Георетична част			
	2.1.CFD		6	
	2.1.1.	Моделиране	7	
	2.1.2.	Многофазни системи	11	
	2.1.3.	Числена процедура	14	
	2.1.4.	Интерпретация на полученото решение	17	
	2.1.5.	Приложение на CFD	18	
	2.2.Барботажни колонни реактори			
	2.3.CFD из	следвания на барботажни колони	20	
3.	Експериментална част			
	3.1. Създаване на експерименталното оборудване2			
	3.2. Провеж	кдане на експериментите	26	
	3.3.Създав	зане на мрежата	27	
	3.4. Стацио	нарни симулации	33	
	3.4.1.	Стационарна симулация с отчитане само на съпротивителната сила	33	
	3.4.2.	Стационарна симулация с отчитане и на подемната сила	40	
	3.4.3.	Стационарна симулация с отчитане и на другите сили на		
	вза	имодействие	45	
	3.4.4.	Стационарна симулация в преходния хидродинамичен режим	45	
	3.4.5.	Допълнителна симулация	47	
	3.5. Нестац	ионарни симулация	47	
4.	Заключен	ние и изводи	.51	
Из	ползвана	литература	53	

# 1. Увод.

Изчислителната механика на флуидите (наричана CFD) е инструмент за числено предсказване на флуидните, концентрационните и температурните полета в изследваните обекти. Основните етапи, през които се преминава при числено изследване посредством CFD са: построяването на математичен модел, дискретизацията му, численото му решаване и интерпретация на получените резултати. Основните уравнения съставящи математичните модели са балансовите уравнения на маса, импулс и енергия, от които се определят разпределението на скоростите, наляганията, плътностите и температурите. За моделирането на турбулентни, многофазни и на системи с химични реакции е необходимо да се добавят допълнителни уравнения. Основата на дискретизацията на балансовите уравнения е дискретизацията им в пространството в клетки, имащи наименование в зависимост от използвания метод. При метода на крайните елементи клетките се наричат елементи, а при метода на крайните обеми – контролни обеми, който е и най-използвания метод в CFD. Съвкупността от контролни обеми (или елементи при МКЕ) се нарича мрежа и може да бъде структурирана (когато е изградена от идеални тела) и неструктурирана. Почти всичките комерсиални кодове, а също и тези с отворен код могат да работят и с двата типа мрежи. И в двата случая има изисквания към качеството на мрежите, за да се осигури сходимост и точност на решението. Накрая числените резултати трябва да бъдат представени графично и да се оценят грешките възникващи от използваните модели и схеми на дискретизация.

CFD намира все по-широко приложение в различни индустрии, като аеро-космическа, автомобилна, строителство на различни сгради и съоръжения (едни от последните приложения са при моделирането на вятърни турбини и нефтени сонди), химическа, металургия, машино- и уредостроене и прочие.

В химическата индустрия са много разпространени апаратите, в които флуидите са с многофазна структура – твърди частици във въздушна или течна среда, различни центрофуги и прочие. Специално място заради широкото си разпространение заемат барботажните колони, в които имаме дисперсна газова среда и непрекъсната течна фаза. Барботажните колони намират широко приложение в редица производства, в които има реакции от типа на оксидирането, хидрогенацията, халогенацията, карбонилацията, карбоксилацията, алкиринето, озонацията и пр. Барботажните колони намират голямо приложение и при някои биотехнологични производства, както и пречистването на отпадните води. Това широко приложение на тези многофазни апарати ги прави много примамливи за моделиране от страна на CFD.

Интензивното CFD моделиране на барботажните колонни апарати започва в края на 80-те и началото на 90-те години на XX век. От тогава използваните модели за описание на процесите са претърпели значителна промяна в посока на усложняването си, като този процес продължава и днес. Усложняват се и мрежите използвани при моделирането – в началото са се използвали двумерни мрежи с едва няколко стотин контролни обема, докато днес вече има модели с тримерни мрежи с няколко стотин хиляди крайни обема.

**Цел дипломната работа.** Целта на настоящата дипломна работа е да се изследват хидродинамичните процеси в барботажните колони и да се оцени влиянието на различните сили на взаимодействие между газовата и течната фаза.

За постигане на целта на дипломната работа бяха поставени за решаване следните задачи:

- да се направи подробна литературна справка на публикациите излезли през последните години и посветени на моделиране на процесите в барботажните колонни апарати;
- да се изготви техническа документация, за закупуването на лабораторно оборудване за експериментално изследване на барботажните колони;
- изграждане на геометричен модел на изследваните обекти;
- да се създаде висококачествена мрежа за CFD изследване на барботажните колони;

- да се проведат числени (CFD) симулации на една от барботажните колони, като се използват различни модели за силите на взаимодействие между двете фази;
- да се проведат изследвания в различни хидродинамични режими на работа на колоната;
- да се проведат експериментални изследвания отговарящи на условията от симулациите и да се оцени точността на симулационните резултати.

# 2. Теоретична част.



Фигура 1. Връзки на CFD с останалите дялове на механиката на флуидите (ляво) и дисциплините, от които зависи (дясно). Източник: "Лекционни записки по CFD" на д-р. Габор Янига, Университет "Ото фон Герике", Магдебург.

Нарасналият в последните години натиск за по-бързо създаване на нови и по-качествени продукти и технологични процеси в индустрията доведе до използването на числени симулации в разработването им наред с традиционния експериментален подход. В много случаи числените симулации могат да спестят време и средства, ако се използват като допълващ инструмент към експериментите. Делът от механиката на флуидите, занимаващ със симулации се нарича изчислителна механика на флуидите – на английски <u>Computational Fluid Dynamics или често</u> използваното съкращение CFD (Фиг. 1). Обичайно етапите през, които преминава една CFD симулация са: формулиране на задачата, създаване на математичния модел, численото му решаване, визуализация и интерпретация на резултатите.

Както всички методи на изследване, така и за CFD точното формулиране на задачата, която ще се решава е от първостепенно значение. Това включва определянето на величините, от които се интересуваме, тяхната точност, зависимостите от други параметри, възможните допускания и опростявания и пр. От формулирането на задачата зависят усилията и времето необходими за решението ѝ. Следва съставянето на математичния модел – в основата на всички модели са уравненията на импулсовия (количеството движение), материалния и енергийния баланс, които са частни диференциални уравнения (ЧДУ) (на английски – Partial Differential Equation (PDE)). Всички ЧДУ изискват за решаването им гранични и начални условия (ГУ и НУ) (Boundary & Initial Conditions (BC & IC). Параметрите и константите в уравненията трябва да бъдат зададени по такъв начин, че модела е определен в математичен смисъл, т.е. броя на неизвестните променливи е равен на броя на уравненията. За тези цел може да са необходими някои допълнителни зависимости, като уравнението на състоянието или температурните зависимости на физичните свойства на участващите вещества (например плътност, вискозитет, коефициент на топлопроводност, специфичен топлинен капацитет и др.). Понякога е невъзможно решаването на приетия модел за някакво разумно време – тогава се приемат някои допускания, като осредняване на стойностите, намаляване на броя на променливите или ограничаване на изследваното пространство и времетраенето на изследвания процес.

Така получената система от диференциални, интегрални и алгебрични уравнения е твърде сложна за да бъде решена аналитично, а в най-общия случай такова решение дори несъществува. Ето защо имаме нужда от числено решение. Чрез подходящи алгоритми трябва да получим определена система от линейни алгебрични уравнения, която да даде приближено решение на началния математичен модел. В повечето CFD симулации дискретизацията в пространство се осъществява по метода на крайните обеми (MKO) (<u>Finite Volume Method</u> (FVM)), но практическо приложение в някои случаи има и метода на крайните <u>е</u>лементи (MKE) (<u>Finite Element Method</u> (FEM)). Относително нова алтернатива на тези два класически метода е т.нар. <u>решетъчен метод</u> на <u>Б</u>олцман (PMБ) (<u>L</u>attice <u>B</u>oltzmann <u>M</u>ethod (LMB)) [20].

В резултат на численото решаване на модела се получават огромно количество данни. Тези данни е най-удобно да се представят в графичен вид. Накрая е необходимо да се оцени и полученото числено решение. Това става като се прави проверка на всяка стъпка от изложената процедура – това са т.нар верификация и валидация на модела (Model Verification & Validation).

## 2.1.1. Моделиране.

Основният подход при CFD моделирането е да се използват балансовите уравнения за маса, импулс и топлинна. За тези цел се приема, че изменението на величините във всяка от изследваните фази е непрекъснато, т.е. пренебрегва се дискретния характер на материята и енергията. Общата форма на балансовите уравнения за която и да е величина  $\varphi$  има вида:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\nabla(\vec{v}\,\varphi) - \nabla\vec{J}_{\varphi} + S_{\varphi} \tag{1}$$

където  $\partial \varphi / \delta t$  е производната на  $\varphi$  по отношение на времето и е равна на нула за установени (стационарни) процеси и различна от нула за преходни (нестационарни, неустановени) процеси.  $\nabla(\vec{v}\varphi)$  е конвективния транспортен член ( $\vec{v}$  е конвективната скорост).  $\nabla \vec{J}_{\varphi}$  е дифузионния (молекулен) транспортен член ( $\vec{J}_{\varphi}$  е вектора на дифузионния (молекулен) поток). Тук могат да присъстват и други членове, например когато се моделира турбулентно течение може да има допълнителни членове със същата структура, които се третират от изчислителния алгоритъм по същия начин, както дифузионния транспортен член, но въпреки това те имат различен физичен смисъл. И накрая  $S_{\varphi}$  е източников член, който в голяма степен зависи от типа на величината  $\varphi$ , така например в балансовите уравнения на импулса (количеството движение) това са сили.

**Уравнение на непрекъснатостта.** Основен физичен закон е този за съхранение на масата, от него се получава и т.нар, уравнение на непрекъснатостта:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \vec{v}) \tag{2}$$

където плътността *р* е транспортната величина.

**Уравнение на движението (Навие-Стокс).** Скоростта на флуидното течение е основна величина в CFD и тя се определя от уравнението на движението популярно още, като уравнение на Навие-Стокс:

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} = -\nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \overline{\overline{\tau}} - \nabla p + \rho \vec{g}$$
(3)

Тук скоростта сама по себе си не е транспортната величина – такава величина е импулса  $\rho \vec{v}$ . Тензорът на напреженията  $\overline{\vec{\tau}}$  играе ролята на дифузионния член и е функция от градиента на скоростта. За Нютонов флуид  $\overline{\vec{\tau}}$  има вида:

$$\overline{\overline{\tau}} = \mu \left[ \nabla \overline{v} + (\nabla \overline{v})^T \right] + \left( \kappa - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \overline{v}) \delta$$
(4)

където  $\mu$  е динамичния вискозитет на флуида, който независи от тангенциалното напрежение  $\tau$  и времето t за Нютонови флуиди. Последните два члена в Урав. (3) са градиента на налягането p и силата на гравитацията  $\rho \vec{g}$ . В някои специални случаи могат да присъстват и други сили действащи върху флуида, като електромагнитни или центробежни сили и пр. Две неща затрудняват числената процедура с това уравнение – едното е нелинейната структура на конвективния член, а другото е налягането. Налягането няма свое балансово уравнение и за свиваеми флуиди се използва допълнително уравнението на състоянието ( $\rho = p/(RT)$ ), чрез което се изчислява налягането, тъй като плътността се получава от уравнението на непрекъснатостта. Съвместното решаване на тези три уравнения (това на непрекъснатостта, на състоянието и това на Навие-Стокс) дава полетата на плътността, налягането и скоростта. За несвиваеми флуиди плътността е постоянна величина и уравнението на състоянието неможе да се използва за определянето на налягането. Налягането в този случай се получава от съвместното решаване на уравненията на непрекъснатостта и на движението, като се изисква стойностите на налягането и на скоростта да удовлетворяват едновременно и двете уравнения. Това обикновено се получава чрез използването на двуетапна процедура – първо се приема някаква стойност за градиента на налягането и с тази стойност се изчислява скоростта, а след това се прави корекция на налягането и така итеративно се получават p и  $\vec{v}$  (това е т.нар predictor-corrector алгоритъм).

**Уравнение на концентрациите.** Уравнението на непрекъснатостта се получава от общия материален баланс, но ако имаме многокомпонентна система от интерес са също и концентрациите на участващите вещества. Така имаме и уравнения на компонентния материален баланс за всичките вещества с изключение на едно, които имат вида:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\vec{v}\nabla c + \nabla(D\nabla c) + S_c \tag{5}$$

където D е коефициента на молекулна дифузия, а  $S_c$  е източников член отразяващ промяната в концентрацията на съответния компонент вследствие на химична реакция.  $S_c$  се получава от кинетичните изрази на химичната реакция, които в най-общия случай са нелинейни функции от концентрациите на отделните компоненти.

**Енергийно уравнение.** В CFD енергията в енергийното уравнение е най-често представена под формата на вътрешна енергия и се използва за да се изчисли температурното поле в изчислителната област (домейн):

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = -\nabla(\rho u \vec{v}) - \nabla \dot{\vec{q}} - (\overline{\vec{\tau}} : \nabla \vec{v}) - p(\nabla \cdot \vec{v}) + S_u$$
(6)

където отделните членове отляво надясно са: промяна във времето, конвективен транспорт, топлопроводност, промяна вследствие на вискозна дисипация (вътрешно триене), промяна вследствие на свиваемостта на флуида и накрая източников член отчитащ преобразуването на енергията от един в друг вид. Ако се изследва несвиваем флуид могат да се пренебрегнат някои от членовете, като този на вискозната дисипация и този на свиваемостта, а ако има химична реакция нейния топлинен ефект се добавя като източника на топлина  $S_{\rm hr}$ , така за Урав. (6) се получава:

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} = -\vec{v}\nabla(\rho c_p T) - \nabla(\lambda\nabla\rho c_p T) + S_{hr}$$
<sup>(7)</sup>

където  $\rho$  е плътността,  $\lambda$  е коефициента на топлопроводност, а  $c_p$  е топлинния капацитет. Ако се използва турбулентен модел се използва също и уравнение за величината турбулентна кинетична енергия.

**Гранични и начални условия.** Частните диференциални уравнения участващи в модела не могат да се решат без зададени гранични и начални условия.

Началното условие всъщност са стойностите или някаква функционална зависимост на транспортната величина  $\varphi$  в началото на симулацията за всички контролни елементи.

А що се отнася за граничните условия – те са три типа:

• гранично условие от първи род (гранично условие на Дирихле) – зададена стойност на  $\varphi$  на границата:

$$\varphi\Big|_{BC} = C_{BC_1}$$

• гранично условие от втори род (гранично условие на Нойман) – зададена стойност за производната на *φ* по нормалата на граничната повърхнина:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} \right|_{BC} = C_{BC_2}$$

• смесено гранично условие (гранично условие на Коши) – това е комбинация от стойността на  $\varphi$  и нейната производна на граничната повърхнина:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} \right|_{BC} + C_{BC_3} \varphi \Big|_{BC} = C_{BC_4}$$

Най-често използваните видове гранични условия са:

 вход (inlet) – задават се стойностите на всичките транспортни величини на входа на изчислителната област. Разбира се могат да се задават и функционални зависимости, така например може да се зададе характерния параболичен профил при ламинарно течение; – изход (outlet) – за този тип гранично условие обикновено се задава налягането, а скоростта се изчислява;

– стена (wall) – повечето моделирани системи са обградени от твърда стена, която може да бъде както неподвижна, така и подвижна. За стените се приема, че през тях няма пренос на маса, т.е. те са непропускливи, но могат до провеждат топлина. За целта компонентата на скоростта нормална към повърхността на стената е равна на нула при неподвижни стени и равна на скоростта на стената при подвижна стена. Освен това най-често се приема че тангенциалната компонента на скоростта е нула (това е т.нар. no-slip BC). Когато се решава т.нар. спрегната топлообмена задача се налага да се окажат и температурните гранични условия на стената, например адиабатна стена или стена която топлообменя с околната среда;

– гранично условие за симетрия (symmetry) – при някои задачи имаме симетрия около някоя повърхнина, при това положение може да се разглежда само едната област около тази повърхнина, което спомага за по-бързото решаване на задачата. За да имаме ГУ за симетрия е необходимо да съществува не само геометрична симетрия, но и физична такава по отношение на всичките транспортни величини  $\varphi$ . Всичките градиенти нормални към повърхността на симетрия са нула, а също и компонентите на скоростта нормални към повърхнината на симетрия са нула.

**Турбулентни течения.** При ламинарните течения токовите линии са успоредни една на друга, докато при турбулентните течения има вихрови структури с различна големина, които предизвикват високочестотни флуктуации на всичките транспортни величини. Голямата трудност при решаването на задачи с турбулентност е, че за да се "обхванат" тези високочестотни флуктуации е необходимо да се използват мрежи с много малки размери и много малки стъпки във времето. Броят на клетките N необходими за пълна тримерна турбулентна симулация е равен на

$$N = 5^3 \,\mathrm{Re}^{9/4}$$

(8)

където Re е критерия на Рейнолдс за съответното течение (Фиг. 2). Такива прецизни симулации се наричат директна числена симулация (ДЧС) (Direct Numerical Simulation (DNS)) и са възможни само за някои академични случаи с относително малка стойност на Re. В повечето интересни за практиката случаи точната структура на турбулентното течение не е от такъв голям интерес, докато по-важна е осреднената локална стойност на величините. Понастоящем има два подхода за решаването на този проблем – единият е с осредняване на величините във времето, наречен RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes), а другият е наречен LES (Large Eddy Simulation). При RANS всичките транспортни величини се осредняват за всичките турбулентни флуктуации във времето, което позволява използването на относително груби мрежи за голям брой системи, при това не са необходими големи изчислителни ресурси. Влиянието на турбулентността се отразява с допълнителни уравнения в модела.



Фигура 2. Изисквания за размера на мрежата в зависимост от турбулентния модел, [20].

**LES.** При LES се използва мрежа с такъв размер, който да позволява директната симулация (както е при DNS) на големите турбулентни структури (вихри), докато за малките се използва някакъв моделиращ подход (както е при RANS). Моделирането на малките турбулентни структури се нарича SGS моделиране (Subgrid-scale modelling). Важна величина при LES е т.нар. големина на филтъра *G* (нарича се още филтрираща функция) определяща кои структури са големи и кои малки. Тази величина зависи от големината на мрежата, като така потребителя може да променя стойността ѝ косвено, а по този начин и усилията необходими за решаването на проблема. Транспортните величини се филтрират с филтриращата функция *G*( $\bar{x}, \bar{x}'$ ):

$$\hat{\varphi}(\vec{x}) = \int G(\vec{x}, \vec{x}') \varphi(\vec{x}') d\vec{x}'$$
(9)

тук G описва влиянието на  $\varphi$  в позиция  $\vec{x}$ ' върху филтрираната стойност  $\hat{\varphi}$  в позиция  $\vec{x}$ . Има различни формулировки за филтриращата функция G, но във всичките от тях тя зависи от размера на мрежата. Филтрираното уравнение на движението има вида:

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial \rho} = -\rho \hat{\vec{v}} \nabla \hat{\vec{v}} - \nabla \overline{\vec{\tau}}^s + \mu \nabla^2 \hat{\vec{v}} - \nabla \hat{\vec{p}} + \rho \vec{g}$$
(10)

В това уравнение  $\overline{\tau}^s$  се нарича SGS Рейнолдсов тензор на напреженията и той е валиден само за моделираните малки турбулентни (SGS) структури. Най-използваните SGS модели за малките вихри са тези на Смагорински и те са подобни на EVM моделите при RANS. Изчислителните усилия при една LES симулация са значително по-големи в сравнение с тези при RANS симулациите и към момента могат да се правят само на високопроизводителни компютри с паралелна архитектура.

**RANS.** Осредняването при RANS се основава на факта, че големините на турбулентните флуктуации и останалия поток се различават значително. Поради това всяка транспортна величина може да бъде разделена на осреднена  $\overline{\varphi}$  и променлива  $\varphi'$  стойност:

$$\varphi = \overline{\varphi} + \varphi' \tag{11}$$

Така се получават осреднените уравнения на модела:

$$\nabla \overline{\vec{v}} = 0$$

$$\rho \frac{\partial \overline{\vec{v}}}{\partial t} = -\rho \overline{\vec{v}} \nabla \overline{\vec{v}} - \nabla \overline{\vec{\tau}}_t + \mu \nabla^2 \overline{\vec{v}} - \nabla \overline{p} + \rho \overline{\vec{g}}$$
(12)

Тук вече се появява допълнителен член  $\overline{\overline{\tau}}_i$ , наречен Рейнолдсов тензор на напреженията

$$\overline{\overline{t}}_{t} = \rho \vec{v}' \times \vec{v}' = \begin{pmatrix} \rho v_{x}' v_{x}' & \rho v_{x}' v_{y}' & \rho v_{x}' v_{z}' \\ \rho \overline{v_{y}' v_{x}'} & \rho \overline{v_{y}' v_{y}'} & \rho \overline{v_{y}' v_{z}'} \\ \rho \overline{v_{z}' v_{x}'} & \rho \overline{v_{z}' v_{y}'} & \rho \overline{v_{z}' v_{z}'} \end{pmatrix}$$
(13)

С включването на този допълнителен член системата уравнения става отворена (преопределена). За преодоляването на този проблем има няколко подхода, по които се моделира  $\overline{\overline{\tau}}_t$ . Двете най-често използвани групи модели се наричат вихрово-вискозни модели (<u>Eddy Viscosity Models (EVM)</u>) и модел на Рейнолдсовите напрежения (<u>Reynolds Stress Model (RSM</u>)), като първата група модели са получили по-голямо разпространение, заради по-малките си хардуерни изисквания. По-подробно ще бъде разгледан т.нар. *k*- $\varepsilon$  модел, който е един от най-използваните модели от EVM групата. При този модел Рейнолдсовият тензор на напреженията  $\overline{\overline{\tau}}_t$  е пропорционален на градиента на осреднената скорост с коефициент на пропорционалност  $\mu_t$ , наречен турбулентен (вихров) вискозитет:

$$\overline{\overline{\tau}}_{t} = \mu_{t} \left[ \nabla \overline{v} + (\nabla \overline{v})^{T} \right] - \frac{2}{3} \rho k \delta$$
(14)

където  $\delta$  е делта функция на Кронекер, а k е турбулентна кинетична енергия и се дефинира, като

$$k = \frac{1}{2} \overline{\vec{v}' \vec{v}'} \tag{15}$$

За разлика от молекулния вискозитет  $\mu$ , турбулентния вискозитет  $\mu_t$  независи от типа на материала, а само от вида на течението. За *k*- $\varepsilon$  модела,  $\mu_t$  е функция на турбулентната кинетична енергия *k* и скоростта на дисипацията ѝ  $\varepsilon$ .

$$\mu_t = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{16}$$

Скоростта на дисипация на турбулентната кинетична енергия є е дефинирана, като

$$\varepsilon = \frac{\mu}{2\rho} \left[ \overline{\nabla \vec{v}'} + \nabla \vec{v}'^T \right]^2 \tag{17}$$

Стойностите на *k* и *є* се изчисляват от техни собствени транспортни уравнения:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} = -\nabla(\overline{\vec{v}}\rho k) + \nabla\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\nabla k\right) + \hat{P} - \rho\varepsilon$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} = -\nabla(\overline{\vec{v}}\rho\varepsilon) + \nabla\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\nabla k\right) + C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\hat{P} - C_{\varepsilon 2}\rho\frac{\varepsilon^2}{k}$$
(18)

където стойността на множителя Р се изчислява по

$$\hat{P} = -\frac{\mu_t}{2} \left| \nabla \vec{\vec{v}} + \nabla \vec{\vec{v}}^T \right|^2 \tag{19}$$

Стойностите на отделните константи в k- $\varepsilon$  модела са получени по статистически път от много на брой опити за различни материали, условия, течения и пр. и използваните стойности по подразбиране във всичките солвъри (комерсиални или такива с отворен код) са:

 $C_{\mu} = 0,09;$   $C_{\varepsilon 1} = 1,44;$   $C_{\varepsilon 2} = 4,92;$   $\sigma_{k} = 4,0;$   $\sigma_{\varepsilon} = 1,3.$ 

Разбира се стойностите на тези константи могат да се променят според желанието на потребителя. Трябва да се подчертае, че *k*-*є* модела е валиден само при напълно развито изотропно турбулентно течение. Ако тези изисквания не са спазени е необходимо да се използва друг метод за моделиране на турбулентността, като RSM или дори LES.

## 2.1.2. Многофазни системи.



Фигура 3. Класификация на многофазните системи по геометричен признак, [20].

Многофазните системи се характеризират с междуфазова повърхност, при която свойствата на флуида (флуидите) се изменят скокообразно. Една от възможните класификации е тази по геометричната структура на системата. Когато отделните фази са с приблизително еднакъв обем, тогава системата се нарича *прекъсната* (discontinuous system). А ако една от фазите е съставена от твърди или флуидни частици с малки размери в сравнение с тези на общата система, то тази система се нарича *дисперсна* (Фиг. 3). Частиците се наричат дисперсна фаза, а останалата част от системата се нарича непрекъсната. Основната величина, характеризираща многофазните системи са обемните части на всяка от участващите фази  $\alpha_i$ . За *i*-тата фаза това е отношението на заемания от нея обем  $V_i$  към този на цялата система V:

$$\alpha_i = \frac{V_i}{V} \tag{20}$$

Сумата на всичките обемни части е единица:

 $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 1 \tag{21}$ 

Друга много важна величина за многофазните дисперсни системи е разпределението на частиците по големина (Particle Size Distribution (PSD)). Много взаимодействия между отделните фази зависят от PSD, като например Архимедовата сила (buoyancy force) или топлообмена, ето защо е необходимо да се знае и PSD. Най-лесните за моделиране системи са монодисперсните системи, при които всичките частици са с еднаква големина. Възможно е в някои случаи междуфазните взаимодействия да не се изчисляват или да се пренебрегнат, в този случай системата може да се моделира като монодисперсна. Ако разпределението по размери трябва да се вземе предвид, тогава размера на частиците става независима променлива, което увеличава значително сложността на решаваната задача. PSD е от значение за всички случаи, при които има изменение на размера на частиците в широки граници или когато има промяна в размера на частиците вследствие на някакъв процес, например изпарение, агломерация, коалесценция, дробене и др. Изчисляването на големината на частиците става, чрез решаването на т.нар. Population Balance Equation (PBE).

Още една характеристика на дисперсните системи е относителната скорост между отделните фази. Ако отделните фази са с близка плътност или дисперсната фаза е съставена от много малки частици, то тогава може да се приеме, че двете фази се движат с еднаква скорост.

Друга класификация на многофазните системи може да се извърши по това как фазите променят състоянието си при взаимодействието си. Ако частиците се придвижват заедно с непрекъснатата фаза, но влияят незначително върху скоростното ѝ поле (или което и да е друго поле, температурно, това на налягането, плътността и пр.), то това взаимодействие се нарича *едностранно* (one-way interaction) взаимодействие. Системи с такова взаимодействие не е необходимо да се моделират като многофазни – скоростното поле в този случай се моделира като за еднофазна система, а обемните части се третират като концентрации. Ако има разлика в скоростите на отделните фази, това предизвиква реципрочен пренос на импулс (количество движение) между отделните фази и такова взаимодействие се нарича *двустранно* (two-way interaction). А ако в допълнение към двустранното взаимодействие обемните части на дисперсните фази са толкова големи, че трябва да се отчете взаимодействието по между им, както и това между тях и стените, то тогава имаме т.нар. *четиристранно* (four-way interaction) взаимодействие.

При прекъснатите многофазни система отделните фази немогат да се разграничат лесно една от друга, поради взаимното им равномерно проникване, като вследствие на това градиентите на транспортните величини, в която и да е от фазите са твърде големи за да се пренебрегнат. Начинът, по който се моделират такива системи е отделните фази да се третират като еднофазни и в допълнение към това да се опишат и условията при междуфазовата повърхност. Този подход работи добре, ако обемите заети от отделните фази са значителни в сравнение с общия обем на системата.

Условията при междуфазовата повърхност представляват гранично условие за отделните фази. Ето защо е необходимо да се дефинират по две условия във всяка от клетките на мрежата. Едното условие е за равенство на потоците през тази повърхност, тъй като на нея неможе да се акумулира нито импулс, нито маса, нито енергия. А другото е задаване на някакво съотношение между транспортните променливи от двете страни на междуфазовата повърхност. Вследствие на поslip условието при междуфазовата повърхност тангенциалните компоненти на скоростта са равни. А освен ако няма значителен месопренос през повърхността (какъвто е случая при топенето или изпаряването например), то тогава и нормалните компоненти на скоростта са равни. Термичното равновесие означава, че температурата на отделните фази от двете страни на граничната повърхност е една и съща.

Методите за моделиране на многофазни дисперсни системи в CFD са два – метод Ойлер-Ойлер и метод Ойлер-Лагранж.

Метод Ойлер-Ойлер. Методът Ойлер-Ойлер е предпочитания метод за моделиране на системи с относително големи стойности на обемните части на дисперсните фази, а също така и за системи с относително големи по размери частици на дисперсните фази. Трябва да се отбележи, че промените в турбулентността вследствие взаимодействието на фазите не са все още добре развити. PSD може да бъде описано само с големи изчислителни усилия, защото повечето сили на

междуфазово взаимодействие са функция на PSD, поради което частиците с различни размери се обособяват в отделни класове (size classes) и всеки такъв клас се третира като отделна фаза. Транспортните уравнения при този метод са същите както за еднофазните системи, но са умножени с обемните части на съответната фаза и са добавени някои източникови членове, които да отразят междуфазовите взаимодействия. За уравнението на движението такива взаимодействия са сили. За всичките системи, при които има относителна скорост между отделните фази силата на съпротивлението (drag force) е от най-голямо значение. Това е основната сила, която предотвратява непрекъснатото увеличаване на относителната скорост между фазите. Други сили, които се вземат предвид в зависимост от свойствата на отделните фази са: силата възникваща при относителното ускорение между фазите, т.нар. виртуална (придадена) масова сила (virtual mass или added mass force); сила на Басет; подемната сила (lift force), както и други сили възникващи в различни точки на частиците поради различните скорости на фазите (например, сила на Сафман, сила на Магнус и пр.) (Фиг. 4). За системи, при които има значителен масообмен през междуфазовата повърхност трябва да се отчете, че има също и пренос на импулс и топлина. Това става чрез допълнителни членове в уравненията на непрекъснатостта, движението и енергийното уравнение.



Фигура 4. Различни сили на взаимодействие между дисперсната и непрекъснатата фаза, [2].

Метод Ойлер-Лагранж. При този подход за моделиране на дисперсни многофазни системи непрекъснатата фаза се моделира с познатите уравнения за еднофазна система с добавени членове отразяващи взаимодействията между фазите. Докато дисперсната фаза се моделира по различен начин. Частиците се разделят на отделни групи, които се разпределят по такъв начин в изследваната област, че да дават представа за обемните части и свойства на дисперсната фаза. Траекториите и скоростите за всяка от тези групи  $P_i$  се получават от следните обикновени диференциални уравнения:

$$\frac{dx_{P_i}}{dt} = \vec{v}_{P_i}$$

$$m_{P_i} \frac{d\vec{v}_{P_i}}{dt} = \sum \vec{F}_i$$
(22)

където  $\vec{x}_{P_i}$  е местоположението на *i*-тата група,  $\vec{v}_{P_i}$  е нейната скорост,  $m_{P_i}$  е нейната маса и  $\vec{F}_i$  са силите възникващи между фазите. Силите във второто от двете Урав. (22) са същите, като в метода Ойлер-Ойлер. Преносът на маса и енергия също трябват да бъдат отчетени. Обемът на отделните групи с частици не може да бъде по-голям от размера на най-малката клетка на мрежата. При поголеми обемни части на дисперсната фаза е възможно да има повече от една група с частици в една клетка във всеки един момент от време, поради това този метод се използва за малки сумарни обемни части на всичките дисперсни фази – до около 1-2 %, и изключително рядко в някои случаи до 5 %. Освен това изчислителните усилия се повишават много с увеличаването обемните части на дисперсните фази, защото е необходимо да се увеличи и броя на групите с частици, поради тези причини този метод се използва по-рядко в практиката в сравнение с метода Ойлер-Ойлер. Но от друга страна този метод предоставя по-добри модели за влиянието на частиците върху турбулентността. Освен това чрез дефинирането на групи с различни свойства дава възможност да се моделира PSD с много малко допълнителни усилия. Идеалният вариант би бил да се извършват симулации на една и съща система и с една и съща мрежа и по двата метода за моделиране на дисперсни многофазни системи.

**Метод Volume of Fluid.** Когато междуфазовата повърхност се премества значително се използва метода наречен <u>V</u>olume <u>of F</u>luid (VOF). При него обемните части стават транспортна променлива и имат транспортно уравнение подобно на това при метода Ойлер-Ойлер. Обемните части в повечето клетки са или единица или нула и само при междуфазовата повърхност тази стойност е между тези две гранични стойности. Точното местоположение на граничната повърхност зависи от обемните части в клетката, а ориентацията ѝ в пространството е нормална на градиента на обемните части.

## 2.1.3. Числена процедура.

Системата от интегродиференциални и алгебрични уравнения може да бъде решена аналитично само за малък брой случаи. За всички останали важни практически случаи е необходимо компютърно-базирано числено решение. Основната идея на численото решаване е да се замени ЧДУ, което е непрекъснато дефинирано във времето и пространството със система от алгебрични уравнения, която дава решение само за предварително дефинирани дискретни точки или дискретни интервали. За метода на крайните разлики (МКР) (Finite Difference Method (FDM)) се изчисляват стойности за отделни точки, за МКО се получават стойности, които са постоянни за целия обем на клетката, а при МКЕ се получават коефициентите на полиномиалната функция, която дава решението за съответния елемент. Всичките тези решения са за всеки дискретен момент от време. За да се получи такова числено решение е необходимо първо да се извърши дискретизация на системата във времето и пространството. Времето е едномерна независима променлива и просто се разделя на дискретни интервали наречени стъпка във времето (time step). Стъпката във времето може да бъде както постоянна, така и променлива за цялото времетраене на симулацията. Изборът на големината на стъпката във времето зависи от желаната точност на решението, устойчивостта на изчислителната процедура (тези два критерия изискват намаляване на стъпката) и от времето необходимо за решаването на задачата (обикновено се иска увеличаване на големината), освен това в някои изчислителни схеми големината на стъпката във времето е обвързано и с размерите на мрежата. Дискретизацията на пространството при двата най-използвани в CFD подхода (МКО и МКЕ) изисква разделянето на цялата изследвана област на по-малки неприпокриващи се клетки, които заедно образуват т.нар. мрежа.

Мрежите се делят на структурирана (structured grid) и неструктурирана (unstructured grid). При структурираната мрежа отделните страни на клетките са успоредни една на друга и може да бъде равномерна и неравномерна. Фигурите за структурираната мрежа са шестостени и четириъгълници при двумерна мрежа (hexahedral mesh). Този тип мрежи имат ограничено приложение при сложни геометрии, защото създаването им е много трудно (а понякога и невъзможно), но за лесни геометрии се генерират сравнително лесно. При неструктурираните мрежи страните на клетките се пресичат и фигурите са неправилни, което ги прави предпочитани за сложни геометрии, но за сметка на това автоматичното им генериране е трудно. Фигурите на неструктурираните мрежи са шестостени (hexagons), триъгълни призми (wedges), четириъгълни пирамиди (pyramids) или тетраедри (tetrahedrons), а в двумерния случай това са четириъгълници или триъгълници. Най-честите изисквания към мрежите са:

• геометрични – външните граници на мрежата трябва да пресъздават геометрията колкото се може по-добре за да може граничните условия да се зададат коректно;

• физични – за да се получи решение със желаната точност е необходимо мрежата да бъде пофина в областите където има рязка промяна в градиентите и в областите където градиентите не са постоянни, а променливи. Това изискване е проблемно, защото градиентите стават известни след решението на проблема. В редица случаи, когато има разбиране за същността на изследвания процес е възможно да се знае къде ще има нужда от такова намаляване на размерите на мрежата, но пък в други ситуации е необходимо да се направи едно предварително решение с груба мрежа за да се разбере къде е това. Трябва да се отчете, че при турбулентни течения е необходимо да има няколко успоредни слоя на външната стена за да може да се моделира ламинарния подслой;

• числени – числените изисквания зависят главно от това кой метод се използва за решението (МКО или МКЕ) и начина, по който е реализиран. Важно е също и с какво мрежа е възможно да работи солвъра, само структурирана или е възможно да работи и с двата вида – структурирана и неструктурирана. Също така, ако е възможно съседните клетки нетрябва да имат голяма разлика в размерите си.

В повечето случаи е необходим голям брой клетки за да се изпълнят задоволително всичките изисквания към мрежата, което пък от своя страна може да доведе до твърде продължително времетраене на изчислителния процес. Ето защо е необходимо да се направи някакъв компромис с размера на мрежата.

**МКО.** Най-разпространеният числен метод използван в CFD е МКО. Това е метода използван от най-популярните комерсиални солвъри – ANSYS CFX, ANSYS Fluent [3] и CD-Adapco Star-CCN+. Основната идея при МКО е, допускането че във всяка клетка от мрежата (при МКО клетките се наричат контролни или крайни обеми) всичките величини са постоянни и балансовите уравнения се интегрират за всичките контролни обеми на мрежата. Нека вземем Урав. (1), което е общото балансово уравнение на транспортната величина  $\varphi$ . Разглежда се двумерния стационарен случай, т.е. времепроизводната е равна на нула, тогава уравнението придобива вида:

$$0 = -v_x \frac{\delta\varphi}{\delta x} - v_y \frac{\delta\varphi}{\delta y} + \frac{\delta}{\delta x} \left(\Gamma \frac{\delta\varphi}{\delta x}\right) + \frac{\delta}{\delta y} \left(\Gamma \frac{\delta\varphi}{\delta y}\right) + S_{\varphi}$$
(23)

където  $\Gamma$  е молекулярния транспортен коефициент, които се предполага, че е известен заедно със скоростното поле. Дискретизацията се извършва за равномерна структурирана мрежа, но при МКО могат да се използват също и неравномерни и неструктурирани мрежи (Фиг. 5). Използваните обозначения са компасни и с главни букви са означени възлите на мрежата, а с малки са точките от граничните повърхности на крайните обеми.



Фигура 5. Използвани означения при МКО, [20].

Крайната система от линейни алгебрични уравнения може да съдържа само означения с главни букви. Интегрирането на Урав. (23) по контролния обем дава:

$$0 = -\int_{V} v_x \frac{\delta\varphi}{\delta x} dV - \int_{V} v_y \frac{\delta\varphi}{\delta y} dV + \int_{V} \frac{\delta}{\delta x} \left(\Gamma \frac{\delta\varphi}{\delta x}\right) dV + \int_{V} \frac{\delta}{\delta y} \left(\Gamma \frac{\delta\varphi}{\delta y}\right) dV + \int_{V} S_{\varphi} dV$$
(24)

Преминаването от обемен към интеграл по повърхност, чрез теоремата на Гаус и последващото му решение водят до:

$$0 = -\int_{A} \vec{n} v_{x} \varphi dA - \int_{A} \vec{n} v_{y} \varphi dA + \int_{A} \vec{n} \left( \Gamma \frac{\delta \varphi}{\delta x} \right) dA + \int_{A} \vec{n} \left( \Gamma \frac{\delta \varphi}{\delta y} \right) dA + \int_{V} S_{\varphi} dV$$

$$0 = -(v_{x} A \varphi)_{e} + (v_{x} A \varphi)_{w} - (v_{y} A \varphi)_{n} + (v_{y} A \varphi)_{s} + \left( \Gamma A \frac{\delta \varphi}{\delta x} \right)_{e} - \left( \Gamma A \frac{\delta \varphi}{\delta x} \right)_{w} + \left( \Gamma A \frac{\delta \varphi}{\delta y} \right)_{n} - \left( \Gamma A \frac{\delta \varphi}{\delta y} \right)_{s} + \bar{S}_{\varphi} V$$

$$(25)$$

където  $A_{\rm e}$ ,  $A_{\rm w}$ ,  $A_{\rm n}$  и  $A_{\rm s}$  са площите на съответните повърхности на контролния обем. След това се апроксимират и производните на  $\varphi$ . Това става например с централна разлика от втори род:

$$\left(\Gamma A \frac{\delta \varphi}{\delta x}\right)_{e} = \Gamma_{e} A_{e} \left(\frac{\varphi_{P} - \varphi_{E}}{\delta x_{EP}}\right)$$
(26)

където  $\delta x_{EP}$  е разстоянието между точките Р и Е. Накрая е необходимо е да се заместят и стойностите на  $\varphi$  за повърхностите на контролния обем с някаква функция на възловите стойности. Това става по някоя от следващите три начина:

– права ("наветрена") диференчна схема (<u>U</u>pwind <u>D</u>ifferencing Scheme (UD)) – при тази схема стойността на граничната повърхност на контролния обем е равна на съответната възлова стойност

(27)

$$\varphi_e = \varphi_E$$

Тази схема дава безусловна устойчивост и стойностите получени с нея винаги спазват физичните ограничения (напр. не се получават отрицателни стойности за концентрациите), но е от първи ред, което означава и по-големи стойности на грешката. Освен това има свойството да заглажда големите промени в градиентите – това свойство се нарича числена дифузия (numerical diffusion). Тази грешка има минимална стойност, когато вектора на скоростта е успореден на нормалата на страните на контролния обем;

– централна диференчна схема (Central Differencing Scheme (CD))

$$\varphi_e = \frac{\delta x_{Ee} \varphi_E + \delta x_{eP} \varphi_P}{\delta x_{EP}}$$
(28)

Това е схема с условна устойчивост, при която могат да се появят осцилации в решението и това евентуално да доведе до разходимост на итеративната процедура. Грешката при нея е по-малка, защото е от втори ред и се препоръчва за процеси с добре изразена дифузия;

– <u>Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics (QUICK)</u>

$$\varphi_{e} = -\frac{1}{8}\varphi_{EE} + \frac{6}{8}\varphi_{E} + \frac{3}{8}\varphi_{P}$$
<sup>(29)</sup>

Това е комбинация на предходните две схеми и основа за повечето схеми от трети ред използвани днес. При нея има осцилации, но по-малки от тези при централната диференчна схема и се препоръчва за систми с малка дифузия.

Накрая за източниковият член се използва линейна апроксимация:

$$\overline{S}_{\varphi}V = S_0 + S_1\varphi$$

Дискретизация във времето. При нестационарни процеси времепроизводната е различна от нула и в такъв случай и тя трябва да се интегрира. След нейното интегриране и дискретизацията в пространството по МКО от Урав. (1) се получава:

$$a_{P}^{t+\Delta t}\varphi_{P}^{t+\Delta t} = a_{E} \Big[ f\varphi_{E}^{t+\Delta t} + (1-f)\varphi_{E}^{t} \Big] + a_{W} \Big[ f\varphi_{W}^{t+\Delta t} + (1-f)\varphi_{W}^{t} \Big] + a_{N} \Big[ f\varphi_{N}^{t+\Delta t} + (1-f)\varphi_{N}^{t} \Big] + a_{S} \Big[ f\varphi_{S}^{t+\Delta t} + (1-f)\varphi_{S}^{t} \Big] + a_{P}^{t}\varphi_{P}^{t}$$
(30)

където *f* е тегловен коефициент и от неговата стойност зависи типа на схемата във времето;  $a_p^{t+\Delta t}$  и  $a_p^t$  са коефициенти зависещо линейно от *f*, а  $a_i$  са коефициенти, които отразяват дискретизацията в пространството. В зависимост от стойността на *f* имаме следните методи:

• явен метод (explicit method) – при този метод f = 0. Този метод е лесен за реализиране, защото се получава система от независими линейни алгебрични уравнения и е с точност от първи ред и има условна устойчивост. При него стойността на  $\varphi$  в момента  $t + \Delta t$  ( $\varphi_P^{t+\Delta t}$ ) зависи само от стойности от предишния момент от време t (Фиг. 6а). За конвективни процеси (каквито са повечето процеси моделирани чрез CFD) е необходимо да се спазва, т.нар. условие на Курант-Фридрих-Леви:

$$C_{\Delta} = \frac{|v|\Delta t}{\Delta x} \le 1 \tag{31}$$

където С<sub>∆</sub> се нарича число (критерий) на Курант;

• неявен метод (implicit method) – при този метод f = 1. Методът е с точност от първи ред и е с безусловна устойчивост. При него стойността на  $\varphi$  в настоящия момент  $t + \Delta t \ (\varphi_p^{t+\Delta t})$  зависи от стойността на  $\varphi$  в предишния момент от време  $t \ (\varphi_p^t)$ , както и от стойностите на повърхностите на

контролния обем в настоящия момент  $t + \Delta t$  ( $\varphi_i^{t+\Delta t}$ ) (Фиг. 66). Този метод е единствения метод реализиран в ANSYS CFX ([1] и [2]);

• метод на Кранк-Николсон – при него f = 0,5. Това е метод с условна устойчивост, който дава възможност да се използват по големи стойности за числото на Курант от явния метод и е с точност от втори ред. Стойността  $\varphi_p^{t+\Delta t}$  зависи, както от стойности от предишния момент, така и от настоящия (Фиг. 6в).



а) явен метод б) неявен метод в) метод на Кранк-Николсон Фигура 6. Методи за дискретизация във времето, [20].

#### 2.1.4. Интерпретация на полученото решение.

Обемът на получената информация получена при решението на моделите е твърде голям, за да бъде интерпретиран директно в числен или табличен вид. Ето защо се използва графично представяне на информацията, която освен това се асимилира и по-лесно. Визулазиацията освен това спомага да се видят и грешки в модела. За да се прецени качеството на симулацията може да се направи анализ на грешките, които биват:

– моделни грешки – това са грешки между действителните физични величини и тези получени при решаването на модела. Този тип грешки възникват от опростявания на модела, поради неговата сложност или защото се изисква прекалено дълго време за изчисляването му (например не се отчита температурната зависимост на някои величини, опростено моделиране на ГУ и пр.). Други възможности са неправилно приет модел (например избор на грешен турбулентен модел и др.). Даването на количествена оценка на този тип грешки е трудно, защото трябва да има с какво да се сравнят резултатите – например аналитично решение по класическите методи или с експериментални резултати. Възможно е също да се направи съпоставка с друга подобна симулация;

– грешки от дискретизацията – това са грешки произтичащи от разликата в решението между непрекъснатите уравнения и техния дискретен аналог. Стойността на някаква величина в една точка получена от решението на оригиналните уравнения и дискретните ще се различава. Дискретната форма на уравненията се получава, чрез разлагането им в ред на Тейлор и от този ред се вземат найчето само членовете от първи или втори ред, а членовете от по-висок ред се пренебрегват. Това пренебрегване е и причината за наличието на грешка от дискретизацията. Следователно, колкото по-висок е реда толкова по-малка е грешката. Трябва да се отбележи, че точността се увеличава с увеличаването на реда, но за сметка на това се увеличават и осцилациите в решението. Членът, след който по-високите са пренебрегнати се нарича *степен на точност* и той служи за оценка на този тип грешка. Степента на точност е валидна само за мрежата, за която е сметната. Това означава, че не е задължително ако има друга мрежа на същата геометрия с по-висока степен на точност да даде по-малка грешка. Ето защо обикновено се намалява размера на мрежата, а не се избира по-висок ред при дискретизацията;

– грешка от итеративната процедура – получената при дискретизацията система от линейни алгебрични уравнения се решава итеративно. Итеративната процедура се стреми да достигне до решението на системата асимптотично, но тя се прекратява, когато се достигне някакво желано ниво на точност. Най-честият критерий за прекратяване на итерациите е остатъците (residuals) да са по-малки от някаква гранична стойност. Този критерий може да се използва, както самостоятелно така и в комбинация с други два. Първият е да се следят балансите и когато дисбаланса в системата е по-малък също от някаква гранична стойност да се спре търсенето. Другата възможност е да се следи някаква величина, която представлява интерес (например температурата на изхода на апарата) и ако в продължение на няколко итерации няма промяна в стойността ѝ също да се прекратят изчисленията;

– грешка от представяне – тази грешка се появява, защото в компютърната памет всички числа с плаваща запетая (или най-общо казано десетични дроби) (Floating Point Number) се представят с някакъв краен брой цифри. В повечето комерсиални CFD кодове има възможност да се избират изчисления с единична (нормална) точност (single precision) или двойна точност (double precision). При единичната точност числата са 32 битови, а при двойна точност са 64 битови. За симулации на многофазни системи е препоръчително използването на числа с двойна точност.

## 2.1.5. Приложение на CFD.

Значението CFD симулациите в индустрията се увеличава значително в последното десетилетие. Но познанията на потребителите са много по-големи в областите на механиката на флуидите и химичното инженерство и в по-малка степен в областта на числените методи и програмирането. Ето защо практическите проблеми се решават с комерсиални кодове, които имат едно високо ниво на абстракция, което е над числените модели. Освен това те са и с относително лесен за разбиране и работа потребителски графичен интерфейс. Налични са също обучение и поддръжка. Това наред с постоянно увеличаващата се изчислителна мощност са причините за бурното им развитие и разпространение. Добре е да се подчертае, че универсален комерсиален код няма. Различните кодове са специализирани в различни области и преди да започнем моделирането трябва да проверим областите на приложение. Често е възможно да се инсталират допълнителни модули към основния код, но тогава първо е редно да се види дали няма специализиран код, който да е по-добър или по-евтин. Редица от успешните практически приложения на CFD в областта на химичното инженерство са: тръбни реактори; апарати с разбъркване; кристализатори; мембранни реактори, барботажни колони и много други.

## 2.2. Барботажни колонни реактори.

Барботажните колонни реактори или само барботажни колони (bubble columns) са апарати, в които газ под формата на мехурчета влиза в контакт с непрекъсната течна фаза. Целта на този контакт може да бъде само разбъркване на течната фаза, но също така може да има и масопренос на вещества от едната в другата фаза. Последното е много често използвано при химичните реакции протичащи в течна фаза. Течната фаза е възможно да съдържа твърди инертни частици, каталитично активни течни и твърди вещества, както и реагенти. Най-честите реакции и производства в барботажни колони са оксидация, хидрогениране, халогениране, алкилиране, обработване на отпадни води, хидрометалургични процеси, разбъркване на течни стомани и пр. ([12] и [29]).



а) обикновена конструкция; б) с решетъчни тарелки; в) с пълнеж; г) еърлифт реактор с вътрешна циркулация; д) еърлифт реактор с изнесена циркулационна тръба. Конструктивни особености. Мащабите на тези апарати варират от  $100 - 300 \text{ m}^3$  при високотонажните производство до най-големите апарати за пречистването на отпадни води с обеми до 20 000 m<sup>3</sup>. Съществуват много различни решния в оформлението на барботажните колони. Най-простите (Фиг. 7а) са с подаване на газа в дъното на колоната с последващо изплуване нагоре по височината към свободната повърхност. Течността може да се движи, както в правоток, така и в противоток на газовата фаза. В биотехнологичните производства се използват широко колони с периодично действие, при които течната фаза не протича през апарата постоянно, а само се подменя през определен период от време. Газът подаван в колоната представлява смес от чист и рециркулиран газ. Този прост тип конструкция се използва сравнителни рядко в практиката. Най-използваните в практиката колони са тези с тарелки (Фиг. 7б) и пълнеж (Фиг. 7в). Разбира се съществуват и още по-сложни конструкции но те се използват в специални случаи.

Отделен клас барботажни колони са апаратите, в които е обособена зона за циркулация на течността. Тези апарати се наричат еърлифт реактори (air-lift loop reactors). При тях е възможно да има, както вътрешна циркулация на течността (Фиг. 7г), така и да бъдат с изнесена циркулационна тръба (Фиг. 7д). Най-често този тип апарати намират приложение при биологичното третиране на отпадни води.

Обичайно, газа се диспергира при въвеждането си в колоната, като целта е да се създадат малки газови мехурчета, които са равномерно разпределени по напречното сечение на апарата, като по този начин се постига по-добро разбъркване на течността и се интезифицира масообмена. Мехурчетата се получават чрез пропускането на газа през отвори или порьозна среда или чрез смесването на газа с бърза струя течност. Устройствата използвани в първите два случая се наричат статични смесители (static spargers) и са показани на Фиг. 8а-г. При тях образуването на мехурчетата става без да се внася някаква допълнителна енергия отвън. Най-използваните конструкции са тези с перфорираната тарелка и перфориранта тръба. Ако е желателно да се получат много малки мехурчета, тогава се използват и порьозни плоскости. Другият тип устройства се наричат динамични смесители (dynamic spargers) и при тях се използва енергията на течната струя за диспергирането на газа. Най-използваните конструкции от този тип са т.нар. двуфазна струйна дюза и ежекторите и са показани на Фиг. 8д и 8е.



Фигура 8. Различни конструкции на смесители (spargers), [29]. От а) до г) – статични; д) и е) динамични. а) тръба; б) перфорирана тарелка; в) перфорирана тръба; г) порьозна плоча; д) двуфазна струйна дюза; е) ежектор.

**Режими на работа в барботажните колони.** Барботажните колони работят в един от следните три основни режима в зависимост от приведената скорост (superficial velocity) на газовата фаза и диаметъра на колоната:

 хомогенен режим – при този режим размерите на мехурчета се изменят в много тесен интервал и са разпределени равномерно по напречното сечение на апарата. Големината на мехурчетата зависи от типа на системата газ-течност и от смесителното устройство;

– хетерогенен режим – при по-високи скорости на газовата фаза равномерното разпределение на мехурчетата изчезва, поради увеличаващата се коалесценция, като се образуват турбулентни структури. Появяват се големи мехури, които се движат с по-висока скорост близо до оста на колоната, а малките мехури се движат с по-малка скорост близо до стените на колоната;  периодичен режим – при колоните с малък диаметър при големи скорости на газа се получават големи мехури, които заемат периодично почти цялото сечение на колоната.

Графичната зависимост на отделните режими от приведената скорост на газовата фаза и от диаметъра на колоната е показана на Фиг. 9. Широките преходни интервали между отделните режими зависят от системата газ-течност, смесителното устройство и скоростта на течната фаза.



Фигура 9. Диаграма на различните хидродинамични режими в барботажните колони в зависимост от диаметъра на колоната и приведената скорост на газовата фаза, [12].

По-важните параметри при проектирането и експлоатацията на барботажните колони са:

- размер на мехурчетата;
- скорост на изкачване на мехурчетата;
- процентно съдържание на газовата фаза (gas holdup);
- специфична междуфазна повърхност;
- коефициенти на масопренос.

#### 2.3. CFD изследвания на барботажни колони.

СFD моделирането на барботажните колонни апарати в последните няколко години се намира в сериозен подем, причините за това са постоянно увеличаващата се изчислителна мощ на съвременните компютри (при това с постоянно понижаваща се цена) и използането на нови за тази област модели. Резултатите от тези моделни изследвания се публикуват в отворената литература. Като начало за всяка прочуване на CFD моделирането на барботажни колони може да се посочи ревю-статията на Джоши [16], която обобщава постигнатото в тази област от края на 60-те и началото на 70-те години на XX век до момента на написването ѝ. В нея автора е направил разширено описание на всичките модели, които са били използвани до момента. От обобщението направено там се вижда, че в повечето статии се използва метода Ойлер-Ойлер за многофазното моделиране, освен това в мнозинството случаи се отчита само съпротивителната сила (drag force). Друг много богат източник е сборника статии на Зомерфелд [26]. В него са представени публикации на множество проекти в областта на барботажните колони финансирани от германското правителство. В този сборник има много статии с изцяло експериментална тематика, така и много с резултати от числени симулации. Разглеждат се не само многофазни система газ-течност, но и системи газ-течност.

Много публикации са направени от групата около Ранаде и Джоши ([4-8], [15], [17], [22-24] и [27]). Публикациите, които заслужават по-голямо внимание от тези са [4-5], [7] [15], [17], [23] и [27]. В една от първите публикации в този списък [23] Ранаде и Таялиа изследват колони с отношение на височината към диаметъра им равно на 2 (това са т.нар плитки колони). За моделирането на двуфазните процеси се използва метода Ойлер-Ойлер, а за турбулентността се използва стандартния k- $\varepsilon$  модел. Изследвано е влиянието на две различни статични смесителни устройства (spargers) върху хидродинамиката на течната фаза. Използваният код е Fluent. В [15] е моделирана цилиндрична барботажна колона. Моделите отново са Ойлер-Ойлер и k- $\varepsilon$ . Изследвано е влиянието на различни мрежи – едномерна, двумерна и тримерна (1D, 2D и 3D). Сравнението на симулациите с експериментални данни показват добро припокриване за профилите на аксиалната

скорост на течната фаза и за обемните части на газовата фаза и за трите мрежи, но за вискозитета само симулацията с 3D мрежата дава задоволителни резултати. В [17] е проведено експериментално изследване на колоната от [15]. Измерени са скоростните профили на течната фаза на различни височини в колоната посредством LDA (Laser Doppler Anemometry) метода. След което е проведена CFD симулация със стандартния k- $\varepsilon$  модел за турбулентността, като освен съпротивителната сила е отчетена и подемната сила (lift force). Сравнението между експериментите и симулацията е много добро за всичките величини, с изключение на зоната около смесителя и във върха на колоната, където е поставено изходното гранично условие. Използваното изходно гранично условие е degassing, т.е. през тази граница е възможно да преминава само газовата фаза. В [5] е проведена симулация по метода Ойлер-Лагранж с *k*-*ε* турбулентния модел на колона с правоъгълно напречно сечение. Отново използваният програмен код е Fluent. Изследвани са три колони с различно съотношение на височината към диаметъра им. Получените резултати са сравнени с резултатите от [7], които са получени по метода Ойлер-Ойлер за същата колона. Сравнението между двата метода е задоволително. Особена добра е статията [27] – в нея е проведено изследване на цилиндрична барботажна колона с 3D мрежа. В първата част на статията са изследвани различните сили възникващи между газовите мехурчета и течната фаза. Това са съпротивителната сила, lift force, виртуалната масова сила (virtual mass force) и силата на турбулентна дисперсия (turbulent dispersion force). Изводите са че виртуалната масова сила има малко значение върху получените резултати и може да се пренебрегне, а за силата на турбулентната дисперсия няма все още израз, които да е широко приет от изследователската общност. Във втората част е изследвано влиянието на три различни турбулентни модела, а именно k- $\varepsilon$ , стандартния RSM модел и LES с модел на Смагорински за SGS частта. Резултатите са сравнени с експериментални от предишна публикация. Изводите са че и трите модела имат трудности с аксиалната скорост на течната фаза в зоната на смесителя. В останалата област изненадващо k- $\varepsilon$  модела дава по-добри резултати от RSM за тази величина, съвсем спрямо очакваното LES е най-близо до експеримента.За турбулентната кинетична енергия и Рейнолдсовите напрежения съгласуването с опитните данни е в реда LES – RSM – k-є. Направен е извод, че RSM и LES моделите дават по-добро съответствие (но не значително подобро) но на много по-висока изчислителна цена, ето защо за системи, при които са важни осреднените величини, а не тяхната момента стойност е препоръчителен k- $\varepsilon$  модела. А ако ни интересува някаква моментна стойност, то тогава авторите препоръчват моделирането да се извърши с LES. Последната публикация [4] се отличава с това, че се моделира и разпределението на мехурчетата по големина – PSD, за целта е използвано population balance modelling (PBM), с отчитане на различните скорости на различните скорости (хетерогенен РВМ). В РВЕ се отчитат коалесценцията (coalescence) и дробенето (break-up) на мехурчетата. Сравнението на резултатите с експериментални данни от [25] показва добро съвпадение за размера на мехурчетата, газовото съдържание, аксиалната скорост на течната фаза и турбулентната кинетична енергия.

През втората половина на предходното десетилетие започва все повече да се моделира PSD, както се видя и от [4]. Тази тенденция може да се обясни най-вече с повишаването на изчислителната мощност на компютрите. Други много добри статии с РВМ модели са [9-11], [13] и [29]. В [9] са проведени 2D и 3D симулации на Fluent при различни приведени скорости съответстващи и на хетерогенния режим. Резултатите са в добро качествено съответствие с експерименталните за тримерния случай за малките и големите мехурчета. При симулацията от [29] е използван кода CFX за симулирането на 2D колона. Изследвано е влиянието на четири различни формулировки на коалесценцията и дробенето на мехурчетата, отчетени са и повече сили на взаимодействие между газа и течността – lift force, virtual mass force, както и силата възникваща между мехурчетата и стените на апаратите (wall lubrication force). Изводите са, че различните модели за коалесценцията и дробенето на газовите мехурчета оказват значително влияние върху резултатите. За числената симулация в [10] също е използвана програмата CFX за CFD частта, докато РВМ частта е направена на самостоятелно реализирани изчислителни модули. Използван е както хомогенен, така и нехомогенен PBM модел, турбулентността е моделирана с SST модела. Освен това е приложено и топлинно натоварване върху стените на изчислителната област (domain). Оказва се, че нехомогенния РВМ модел предсказва много добре прехода от хомогенния режим (еднакви по големина мехурчета) към нехомогенния (мехурчетата имат различна големина). Освен

това съвсем очаквано е споменато, че изчислителната стойност на тези модели е твърде голяма. В [13] отново е използван CFX (вече част от ANSYS). Тази симулация е за колоната с правоъгълно напречно сечение и проведена на тримерна мрежа. Турбулентността е моделирана с k- $\varepsilon$  модела и изследвано влиянието на три сили – drag, lift и virtual mass. Установено, е че за приведена скорост на газовата фаза под 1,20 cm/s се получава разминаване между експерименталните данни и симулацията. Също така както и в [27] се вижда че virtual mass force има много малко влияние и спокойно може да се пренебрегне, докато точно обратното важи lift force. Последната статия с PBM е [11]. В нея отново е използвана колоната от [13], като използваната програма е ANSYS Fluent. Използваният турбулентне модел е стандартния k- $\varepsilon$  модел, като освен обичайните сили – drag и lift е отчетена още и турбулентността предизвикана от газовите мехурчета (Bubble Induced Turbulence (BIT)). За PBM частта са използвани два модела: Classes Method (CM) със седем класа и Quadrature Method of Moments (QMOM) с три квадратурни възела. Според авторите получените резултати се припокриват задоволително, но не идеално с експерименталните, като почти няма разлика между резултатите от двата PBM модела. Установено е, че мехурчетата са с размери от 0,8 mm в дъното на колоната до 3 mm на върха ѝ.

В [19] е изследвана способността на моделите без PBM да предсказват преминаването на колоната от един в друг режим. Изследвани са две цилиндрични колони с различни диаметри, като са използвани 2D и 3D мрежи. Използваният код е наречен CFDLib и е тяхна собствена разработка. Изводите са, че за успешното предсказване на режимен преход е необходима фина мрежа. Установено е също, че включването и изключването на различни сили в модела влияе върху предсказващата способност. За по-голямата колона обаче при високи скорости не е се получава преход. Според авторите е необходимо да се включи и PBM моделиране за да бъде успешно предсказването и за този случай.

Използваните турбулентни модели в [30] са LES и k- $\varepsilon$ , като използвания код е CFX. Моделираната колона е с квадратно напречно сечение. Изследвано е влиянието на различни сили – drag, lift и virtual mass, както и BIT, върху хидродинамиката на колоната за k- $\varepsilon$  модела. Получените резултати са сравнени с LES модела и експериментални данни. Съвсем очаквано резултатите от LES са в по-добро съгласие с експерименталните данни.

В [18] е изследвано влиянието на три формулировки на k- $\varepsilon$  модела – стандартния, RNG и realizable k- $\varepsilon$ . Изследваната колона е цилиндрична с тримерна мрежа. Резултатите са сравнени с експериментални и извода е, че най-добрия модел е RNG k- $\varepsilon$ , следван от realizable k- $\varepsilon$  и накрая е стандартния k- $\varepsilon$  модел.

Колоната използвана в [14] е същата, като тази в [11] и [13]. За решаването на модела е използвано ANSYS CFX. Изследвано е влиянието на коефициента на подемната сила  $C_L$  (lift force coefficient) при три различни приведени скорости на газовата фаза. От извършеното съпоставяне с експериментални данни е установено, че за най-малката стойност на приведената скорост включването на члена за подемната сила подобрява качеството на симулацията независимо от стойността на  $C_L$ . За другите приведени скорости този член има малко но все пак положително влияние върху резултатите.

Едно обобщение на литературната справка показва, че:

– в повечето случаи е използвания код е ANSYS Fluent (около 60-65 % от случаите), следван от ANSYS CFX;

– в почти всички от публикациите е използван стандартния k- $\varepsilon$  турбулентен модел, но в последните няколко години интерес започва да предизвиква и LES;

 използваните мрежи са с много проста топология, без да се отчитат физичните особености на колоните (смесители, тарелки и пр.); много по-използвани са двумерните мрежи, но напоследък има тенденция за използване и на тримерни;

– почти винаги използваното изходно гранично условие e degassing, което улеснява изчисленията, но не винаги отразява действителността;

– в началото газовите мехурчета се приемат да бъдат с постоянни размери, но след 2005 година започват и симулации с изчисляване на PSD, като за целта се използва PBM;

 спектъра на използваните сили на взаимодействие между мехурчетата и течността се увеличава непрекъснато, като в повечето случаи влияние оказват само съпротивителната и подемната сила;

– по-използвания многофазен метод е Ойлер-Ойлер (85-90 % от статиите) и по-малко Ойлер-Лагранж.

# 3. Експериментална част.

## 3.1. Създаване на експерименталното оборудване.

Възоснова на техническо задание са изработени чертежи на ново експериментално оборудване, което в последствие бе закупено, като част от един по-голям проект, по който се работи в катедрата по "Механика на флуидите и технически потоци" към университета "Ото фон Герике", Магдебург. Оборудването е сглобено в един лабораторен стенд, представляващ четири безцветни поликарбонатни тръби с дъно, които да могат да се ползват като барботажни колони. Приблизителните размери на колоните трябва да бъдат: вътрешни диаметри 20, 40, 60 и 80 mm и височина 1 m. След, което колоните бяха изчертани с Autodesk Inventor и с тези чертежи колоните бяха поръчани. Действителните размери на доставените колони са: диаметри 19,2; 40; 60,2 и 80,5 mm и височина 1 m. На височина 40 cm от дъното на всяка от колоните се пробива отвор с диаметър 3 mm, през които ще се подава въздух в колоната. Освен тези четири колони бе изчертан и поръчан и универсален капак за тях, който е показан на Фиг.10. За изчертаването му са използвани функциите: 2D Sketch; Extrude и Hole, а за свързването му с една тръбичка, по която могат да бъдат подавани твърди частици в колоната се използва и функцията Constraints.



На Autodesk Inventor се изчертава и обема заеман от флуидите в колоните; тези тримерни модели ще бъдат и геометриите необходими при създаването на мрежите. Към

геометрията на колоните се добавя и маркуча, по който ще се подава въздуха. Това се прави с цел входното за колоната гранично условие да бъде максимално близо до реалното, а не просто някаква кръгла повърхност върху стената на колоната. Използваните за геометриите функции са 2D Sketch, New Plane, Extrude и Sweep. Така създадените колони се записват в step файлов формат (\*.stp), за да се експортват към ANSYS ICEM CFD, за създаването на мрежите (Фиг. 11). Колоните ще бъдат първоначално зареждани с вода до височина 80 ст. Как ще изглеждат колоните в началото на експеримента е показано на диаграмата на Фиг. 12.



Фигура 11. Геометрия на колоната  $\phi$ 40.

На Фиг. 13 е представена графика създадена с Autodesk Inventor показваща как изглежда лабораторния стенд.



Фигура 13. Графика на лабораторния стенд.

## 3.2. Провеждане на експериментите.

Тъй като колоните са с кръгло сечение, за съжаление е невъзможно използването на някакъв оптичен метод за измерването на скоростното поле вътре в тях, като PIV (Particle Image Velocimetry) или PTIV (Particle Tracking Image Velocimetry). Поради което възможните измервания имат по скоро качествен, а не количествен характер. Това са промяната във височината на граничната (свободната) повърхност поради наличието на газовата фаза и след заснемане с видеокамера на времето, за което се издигат газовите мехурчета от входната дюза до свободната повърхност. В началото на всеки опит колоните са напълнени с обикновена чешмяна вода до височина 80 сm, като заради принципа на скачения съд водата преминава и в маркучето на захранващата с въздух система, където се издига до същата височина. След което се подава и въздух от захранващ компресор. Обемният разход (дебит) на въздуха може да се контролира ръчно в границите от 0,5 до 4 L/min. На Фиг. 14 е показана процесната диаграма на експериментите (Process and Instrumentation Diagram (P&ID)).



Фигура 14. Процесна диаграма на експериментите.

С измерената промяна на височината на свободната повърхност  $\Delta h$  се изчислява и обемното процентно съдържание на газ в течността *В* по формулата:

където  $V_{\text{нач}}$  и  $V_{\text{кр}}$ , [m<sup>3</sup>] са съответно обема зает от течността преди пускането на газа и след това; d, [m] е вътрешния диаметър на колоната;  $h_0$ , [m] е нивото на свободната повърхност в началото на опита ( $h_0 = 0.8 \text{ m} = 800 \text{ mm}$ ). Резултатите от експериментите ще се използват за верификация на CFD симулациите.

## 3.3. Създаване на мрежата.

Мрежата оказва огромно влияние върху сходимостта и грешката на полученото решение. Всеки CFD солвър има изисквания не само към топологията на мрежата, но и към качествените ѝ показатели. Например за ANSYS Fluent важни характеристики са, ортогоналния ъгъл (orthogonality angle) и съотношението от площите на страните на клетките на мрежата (aspect ratio), докато за ANSYS CFX са тези две плюс още една нарчена степен на уголемяване на мрежата в два съседни слоя (expansion factor). Минималните изисквания на CFX към тези характеристики са: поне 18° за ortogonality angle, максимум 100 за aspect ratio и максимум 20 за expansion factor. Когато става дума за частта от мрежата, която е в непосредствена близост до стените на апаратите (граничните слоеве) е възможно да се използват и мрежи с много по-големи стойности за последните две характеристики. Инструментът на ANSYS за създаването на такива висококачествени мрежи се казва ICEM CFD.

ICEM CFD е програма, с която е възможно създаването, както на двумерни, така и на тримерни мрежи. Възможните топологии са: хекса мрежи (hexahedral meshes) – това са мрежи съставени от шестостени в 3D пространството и четириъгълници в 2D; тетра мрежи (tetrahedral meshes) – това са мрежи от тетраедри в 3D и триъгълници в 2D; както и хибридни мрежи (hybrid meshes) - мрежа, която може да съдържа едновременно призми, четириъгълни пирамиди и тетраедри 3D шестостени, триъгълни В И четириъгълници и триъгълници в 2D. Възможно е създаването на структурирани и неструктурирани мрежи. При създаването на хекса мрежите се използва т.нар. блокструктурирана стратегия (block structured policy). Това означава, че първоначално мрежата се разделя на отделни части, наречени блокове, като е възможно да се редактира мрежата само в един (или няколко) желан/и блок/а и впоследствие когато сме готови с мрежата да я конвертираме в един цялостен блок и да я експортнем във формат подходящ за използвания в последствие солвър. Силната страна на тази програма е, че е възможно да се следят множество показатели за качеството (метрики) на мрежата още докато тя се създава и ако не сме доволни от нещо да се върнем назад или просто да го изтрием. По същество работата с ICEM CFD е итеративна – извършваме някаква операция върху мрежата, след което проверяваме метриките, следва ново действие, нова проверка и т.н. В ICEM CFD е възможно да се започне от нулата, т.е. и геометрията да бъде създадена с него, но поизползваната алтернатива е да се импортне геометрията от друг САD продукт под формата на step или iges файл и след това да се направят корекции по геометрията (ако е необходимо) преди да се пристъпи към създаването на мрежата. Именно това е варианта използван в настоящата дипломна работа.

Заданието е да се създадат по четири висококачествени мрежи за всяка една от четирите колони. Четирите мрежи трябва да бъдат с приблизително 300 000, 800 000, 1 500 000 и 3 000 000 броя елементи. Мрежите трябва да бъдат от шестостени (т.е. хекса мрежи) и да имат следните метрики: минимална детерминанта 3x3x3 (Determinant 3x3x3) от 0,4 и минимални "качество" (Quality) от 0,3. Детерминанта е нормализирания якобиан на съответния шестостен и стойността ѝ може да се изменя от нула до едно. Детерминанта 3x3x3 равна на 1 съответства на идеален шестостен – правоъгълен паралелепипед.

28

Метриката "качество" всъщност е най-лошата стойност от други три метрики – детерминанта, ортогонален ъгъл и ъглова деформация на клетката.

След като създадената с Autodesk Inventor геометрия се импортне в ICEM CFD тя съдържа точки (points), криви (curves) и повърхнини (surfaces) (Фиг. 15). Тъй като ко-





Фигура 15а. Импортнатата в ICEM CFD геометрия.

Фигура 15б. Крайната геометрия след редакциите.

лоните ще се запълват с вода до височина 80 ст, на тази височина мрежата трябва да бъде с по-голяма гъстота за да се моделира хубаво свободната повърхност. За целта на тази височина се създават още точки и криви. Освен това допълнителни точки и криви се създават и около мястото, където маркучето се съединява с колоната и на извивката на маркучето. Това се прави с цел да се създадат повече блокове в тези зони за по-прецизно следване на геометрията от страна на мрежата. Използваните за целта фунцкии са: create point by coordinates, create point on curve ends, point on curve-curve intersection, point as a parameter along a curve, project point to curve, point as a center of arc, create curve from points, arc, circle и някои други по-рядко използвани функции. Освен това се създават и тела (които в последствие стават домейни в CFX и Fluent) – това става с функцията create body. След което се създават наименования за всичките елементи, това в терминологията на ICEM CFD се нарича parts. Така окончателния геометричен модел придобива вида показан на Фиг. 15б.

При създаването на блоковата структура са възможни два противоположни подхода – единия е да се започне с един голям блок и от него да се изрязват парчета докато се

получи желаната структура (top-down approach), а другия е да се започне с малки блокове, като се добавят нови блокове към вече съществуващите (bottom-up approach). Двата подхода са показани на Фиг. 16. При изработването на настоящите мрежи се използвани и двата подхода, като това е една от причините за различните метрики на мрежи с приблизително еднакви геометрии.



Фигура 16. Използвани подходи за построяване на мрежовите блокове. a) top-down подход; б) bottom-up подход.

Блоковете се създават с функцията create blocks, разделят се със slice blocks и се изтриват с delete blocks. След като са създадени всичките блокове следва асоциация на елементите на блоковете със съответстващите им геометрични такива. На точките съответстват върхове (vertices), на кривите съответстват ръбове (edges), на повърхнините съответстват лица (faces) и на телата съответстват блокове (blocks). Разликата с и без асоциации е показана на Фиг. 17. Следва създаването на т.нар. структура O-grid. С помощта на O-grid се създават мрежи успоредни на стените на геометрията, като в последствие се използват при моделирането на граничните слоеве. На Фиг. 18 е показана една мрежа без и с O-grid.



Фигура 17. Разлика в мрежите (а) без асоциация и с асоциация (б) на мрежовите елементи към геометрията.



Фигура 18. Разлика в мрежите без (а) и с (б) със структурата O-grid.

Предпоследната операция е увеличаване на броя на клетките на мрежата до приблизително желания брой. В Таблица 1 са показани резултатите за всичките създадени мрежи. На Фиг. 19 е показан окончателния вариант на мрежата с 300 000 елемента за колоната с диаметър 40 mm. Последната операция е конвертиране на блоковата структура в неструктурирана мрежа и експорта ѝ към формат за ANSYS Fluent или ANSYS CFX.



Фигура 20. Мрежа на колоната с диаметър  $\phi$ 40 и 300 000 контролни обема.

Диаметър на	Брой клетки в	Минимална	Минимално
колоната, [mm]	мрежата	детерминанта 3х3х3	"качество"
	330 065	0,50	0,50
20	741 120	0,50	0,50
20	1 505 280	0,50	0,50
	3 064 320	0,55	0,55

Таблица 1. Информация за създадените мрежи

	310 784	0,50	0,30
40	801 536	0,50	0,30
	1 527 936	0,55	0,30
	3 063 552	0,55	0,30
	319 104	0,55	0,40
60	794 368	0,55	0,40
00	1 512 000	0,60	0,40
	3 022 720	0,60	0,40
	330 240	0,40	0,40
80	816 128	0,40	0,40
	1 519 296	0,50	0,40
	3 184 512	0,55	0,40

## 3.4. Стационарни симулации.

3.4.1. Стационарна симулация с отчитане само на съпротивителната сила.

Всичките симулации ще бъдат на колоната с диаметър 40 mm, а мрежата ще бъде наймалката – тази с 300 000 клетки и ще се проведат по метода Ойлер-Ойлер. При първата симулация ще се отчита само съпротивителната сила (drag force). Уравненията, които се решават при този модел са за многофазни системи, което означава, че има уравнения за всяка от фазите и че всички членове на общото преносно уравнение се умножават по обемната част на съответната фаза. Така за обобщеното преносно уравнение (Урав. (1)) се получава:

$$\frac{\partial(\alpha_i\rho_i\varphi_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i\rho_i\vec{v}_i\varphi_i) = \alpha_i\nabla \cdot \overline{\vec{\tau}}_i + S_{i,\varphi}$$
(33)

където индекса *i* показва съответната фаза (i = 1, 2, ..., n). Във всички симулации имаме двуфазна система въздух-вода и съответно n = 2, като с 1 (или G) е означена дисперсната фаза (въздуха), а с 2 (или L) е означена непрекъснатата фаза (водата). Освен уравненията на непрекъснатостта и това на Навие-Стокс има още едно сумиращо уравнение за обемните части на фазите:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 1 \tag{34}$$

Уравненията на непрекъснатостта и на Навие-Стокс с пренебрегнат масопренос придобиват вида:

$$\frac{\partial(\alpha_i \rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{v}_i) = 0$$
(35)

$$\frac{\partial(\alpha_i\rho_i\vec{v}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i\rho_i\vec{v}_i\vec{v}_i) = -\alpha_i\nabla p + \alpha_i\nabla \cdot \overline{\vec{\tau}}_i + \alpha_i\rho_i\vec{g} + (\vec{F}_{i,\mathrm{D}} + \vec{F}_{i,\mathrm{Inf}} + \vec{F}_{i,\mathrm{WL}} + \vec{F}_{i,\mathrm{WL}} + \vec{F}_{i,\mathrm{TD}})$$
(36)

където члена със силите отразява силите на взаимодействие между газовите мехурчета и течната фаза. Отделните сили са:  $\vec{F}_{i,D}$  – съпротивителната сила (drag force);  $\vec{F}_{i,lift}$  – подемната сила (lift force);  $\vec{F}_{i,VM}$  – виртуалната масова сила (virtual mass force);  $\vec{F}_{i,WL}$  – силата между мехурчетата и стената на колоната (wall lubriacation force) и  $\vec{F}_{i,TD}$  – силата на турбулентна дисперсия (turbulent disperssion force). Тензорът на напреженията  $\overline{\tau}_i$  има вида:

$$\overline{\overline{\tau}}_{i} = \mu_{i,\text{eff}} \left( \nabla \overline{v}_{i} + \nabla \overline{v}_{i}^{\mathrm{T}} - \frac{2}{3} \delta_{j,l} \nabla \cdot \overline{v}_{i} \right)$$
(37)

В това уравнение делта функцията на Кронекер е единица при j = l (при еднакви пространствени координати) и нула при  $j \neq l$ .  $\mu_{i,eff}$  се нарича ефективен вискозитет и за течната фаза е

$$\mu_{L,\text{eff}} = \mu_L + \mu_{L,t} + \mu_{BIT} \tag{38}$$

Тук  $\mu_{BIT}$  е вискозен член отчитащ допълнителното турбулизиране на течната фаза в областта на ниско налягане след движещите се мехурчетата (<u>Bubble Induced T</u>urbulence (BIT)). Найчесто използвания израз за  $\mu_{BIT}$  е този на Сато:

$$\mu_{\rm BIT} = C_{\mu,\rm BIT} \alpha_G \rho_L d_{\rm b} \left| \vec{v}_G - \vec{v}_L \right| \tag{39}$$

където стойността на коефициента  $C_{\mu,BIT}$  е 0,6 и е взета от [26]. С  $d_b$ , [m] е означен диаметъра на мехурчетата. Ефективният вискозитет на газовата фаза е

$$\mu_{G,\text{eff}} = \frac{\rho_G}{\rho_L} \mu_{L,\text{eff}} \tag{40}$$

Всичките сили на взаимодействие са еднакви по-големина, но с противоположни посоки за двете фази (това е от Трети закон на Нютон). Така за съпротивителната сила имаме:

$$\vec{F}_{L,D} = -\vec{F}_{G,D} = \vec{F}_{D} = 0.75C_{D}\frac{\alpha_{G}\rho_{L}}{d_{b}} |\vec{v}_{G} - \vec{v}_{L}| (\vec{v}_{G} - \vec{v}_{L})$$
(41)

 $C_{\rm D}$  се нарича коефициент на силата на съпротивление (drag force coefficient) и има различни модели за него. Най-популярните са тези на Шилер-Науман, Иший-Зубер и този на Грейс. В настоящата дипломна работа е използван израза на Шилер-Науман, който моделира мехурчетата, като сфери:

$$C_{\rm D} = \begin{cases} \frac{24}{\mathrm{Re}_{\rm p}}, & \mathrm{Re}_{\rm p} < 0,1 \\ \frac{24}{\mathrm{Re}_{\rm p}} \left(1 + 0.15 \,\mathrm{Re}_{\rm p}^{0.687}\right) & 0,1 \le \mathrm{Re}_{\rm p} < 1\,000 \\ 0,44 & 1\,000 \le \mathrm{Re}_{\rm p} < 200\,000 \end{cases}$$
(42)

където с Re<sub>p</sub> е означен критерия на Рейнолдс при обтичане на някакво тяло (частица) (particle Reynolds number) и се изчислява по:

$$\operatorname{Re}_{p} = \frac{\rho_{L} \left| \vec{v}_{G} - \vec{v}_{L} \right| d_{b}}{\mu_{L}}$$
(43)

За турбулентността се използва SST модела с автоматичен избор на това как да третира граничния слой около стените на колоната. Ако мрежата е достатъчно фина до стените тогава граничния слой не се моделира с функция (wall function), а директно се решава. А ако мрежата не е достатъчно фина тогава граничния слой се моделира с мащабираща функция (scalcable wall function). Турбулентният SST модел е комбинация от силните страни на стандартните k- $\varepsilon$  и k- $\omega$  модели. Далече от стените в основния флуиден обем се използва k- $\varepsilon$  модела, а близо до стените се използва k- $\omega$  модела. Уравненията за k и турбулентната честота  $\omega$ , за този модел са:

$$\frac{\partial(\alpha_i\rho_ik_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i\rho_i\vec{v}_ik_i) = \alpha_i\nabla \cdot \left[ \left( \mu_i + \frac{\mu_{i,t}}{\sigma_{k3}} \right) \nabla k_i \right] + \alpha_i P_k - \alpha_i\beta'\rho_ik_i\omega_i + \alpha_i P_{kb}$$
(44)

$$\frac{\partial(\alpha_{i}\rho_{i}\omega_{i})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{i}\rho_{i}\vec{v}_{i}\omega_{i}) = \alpha_{i}\nabla \cdot \left[ \left( \mu_{i} + \frac{\mu_{i,t}}{\sigma_{\omega^{3}}} \right)\nabla \omega_{i} \right] + (1 - F_{1})\alpha_{i}\frac{2\rho_{i}}{\sigma_{\omega^{2}}\omega_{i}}\nabla k_{i}\nabla \omega_{i} + \alpha_{i}\gamma_{3}\frac{\omega_{i}}{k_{i}}P_{k} - \alpha_{i}\beta_{3}\rho_{i}\omega_{i}^{2} + \alpha_{i}P_{\omega b}$$
(45)

Турбулентният вискозитет  $\mu_t$  при този модел е:

$$\mu_{i,i} = \rho_i \frac{k_i}{\omega_i} \tag{46}$$

В Урав.(45)  $F_1$  е функцията определяща дали се намираме близо до стената или не (blending function) и самата тя е сложна функция от разстоянието до най-близката стена и хидродинамичния режим. Точната ѝ формулировка, както и на членовете  $P_k$ ,  $P_{kb}$  и  $P_{wb}$  може да бъде видяна в [2]. Стойностите на коефициентите  $\gamma_3$  и  $\beta_3$  се изчисляват по:

$$\gamma_3 = \gamma_1 F_1 + \gamma_2 (1 - F_1) \tag{47}$$

$$\beta_3 = \beta_1 F_1 + \beta_2 (1 - F_1) \tag{48}$$

Стойностите по подразбиране на константите в Урав. (44), (45), (47) и (48) са:

 $\begin{array}{ll} \gamma_1 = 5/9; & \gamma_2 = 0,44; & \beta_1 = 0,075; & \beta_2 = 0,0828; & \beta' = 0,09; \\ \sigma_{k1} = 2; & \sigma_{\omega 1} = 2; & \sigma_{k2} = 1; & \sigma_{\omega 2} = 1/0,856. \end{array}$ 

След като създадената в ICEM CFD мрежа се импортне в CFX, се създават следните изрази:

airDensity = 1.185 [kg m^-3] airHoldup = volumeAve(air.Volume Fraction)@WATER\_DOMAIN airVF = step((y - freeSurfaceLevel)/1[m]) calcDensity = waterDensity - airDensity freeSurfaceLevel = 0.8 [m] pressureDistribution = calcDensity\*g\*waterVF\*(freeSurfaceLevel - y) waterDensity = 997 [kg m^-3] waterVF = 1 - airVF

Тези изрази се използват при задаването на началните условия и стойностите на плътностите се вземат от [21], за температура 25 °C и налягане от 1 atm. Избира се нехомогенен модел за скоростното поле, при него двете фази имат две независими скоростни полета. Задава се големината на мехурчетата да бъде, колкото диаметъра на входната дюза, т.е.  $d_b = 3$  mm. Въвежда се и гравитацията, като така се отчита Архимедовата сила, заради която мехурчетата изплуват. С началните условия се задава височината на граничната повърхност, разпределението на налягането по височината на колоната, както и скоростите на течната и газовата фаза при t = 0 s. В началото се приеме, че системата се намира в състояние на покой, т.е. скоростите и на двете фази за всичките им компоненти са нула. На Фиг. 20 и 21 е показано изменението на налягането и на обемните части по височината на колоната.



Фигура 20. Начално изменение на налягането в колоната по височината ѝ.



Фигура 21. Начално разпределение на обемните части на двете фази в колоната.

Граничните условия са:

за входа – нормална скорост от 2,36 m/s, което отговаря на обемен разход (дебит) от 1
 L/min (и приведена скорост на газовата фаза от 0,013 m/s) и обемна част на въздушната фаза
 равна на 1 (т.е. входящия флуид е само въздух);

 за изхода – условието е за налягане на изхода равно на атмосферното, т.е. 0 Ра (това условие на английски е Opening) и обемна част на газовата фаза 1 (т.е. през изхода може да преминава само въздух);

- за стената – скоростта на стената и за двете фази е нула, т.е. no-slip BC.

Числените настройки включват определянето схемата на дискретизацията в пространството – това е централната диференчна схема от втори ред (в терминологията на CFX това е High Resolution) за всичките величини с изключение на турбулентните и правата диференчна схема от първи ред (First Order по CFX терминологията) за турбулентните величини. Условието за спиране на итеративната процедура е средноквадратичната стойност на остатъците да е по-малка от  $1.10^{-4}$ . Но както се вижда от симулационния процес тези стойности не се достигат, защото след определен брой итерации се достига до осцилации в решението. Това може да се обясни с факта, че процесите в многофазните системи по природа са неустановени. При това положение критерий за спиране става, когато някоя важна за процеса величина стигне до установяване или стойността ѝ се изменя в тесни граници. За процесите в барботажните колони такава величина е обемното съдържание на въздух с напредването на итерационната процедура.



Фигура 22. Изменение на остатъците (от а до в) и на обемното съдържание на въздух в течността (г) с напредването на итеративната процедура.



Фигура 22. Изменение на остатъците (от а до в) и на обемното съдържание на въздух в течността (г) с напредването на итеративната процедура.

Друга числена настройка е за използвания тип на математическите операции – избират се операции с двойна точност (double precision). Указва се да се използват паралелни изчисления на две процесорни ядра. Използваната компютърна конфигурация е с централен процесор Intel Xeon E3-1230 с 4 ядра (8 нишки с технологията HyperThreading) работещи с номинална тактова честота от 3,30 GHz и 32 GB DDR3 оперативна памет. Операционната система е Scientific Linux 6.5, което е Ubuntu базирана Linux дистрибуция. Времетраенето на симулацията е 3:42 h.

На контурната графика на Фиг. 23 са показани обемните части на въздуха, а на векторната графика на Фиг. 24 са показани скоростите на течната фаза. И двете графики са в централната за колоната равнина. От фигурата с обемните части се вижда, че всъщност газовата фаза не се разпределя в целия обем на колоната под формата на мехурчета с изкачването си, а образува нещо, като канал. Това определено не отразява дори в малка степен действителната ситуация. При експериментите се вижда, че се образуват мехурчета, които в началото се намират близо до стената на колоната, а в последствие с изплуването си преминават в целия обем на колоната. Освен това нивото на свободната повърхност се повишава с 18,5 mm в експеримента, което дава 2,3 % обемно съдържание на въздух във водата, докато при CFD симулацията тази стойност е едва 0,9 %. От това ясно се вижда, че модела отчитащ само съпротивителната сила неможе да моделира коректно системата, ето защо следващата симулация се провежда с





отчитане на подемната сила (lift force).

## 3.4.2. Стационарна симулация с отчитане и на подемната сила.

Математичният модел използван в тази симулация е същия, като предходната с изключение на това, че члена за подемната сила не е нула, а е:

$$\vec{F}_{L,\text{lift}} = -\vec{F}_{G,\text{lift}} = \vec{F}_{\text{lift}} = C_{\text{lift}} \alpha_G \rho_L (\vec{v}_G - \vec{v}_L) \times (\nabla \times \vec{v}_L)$$
(49)

В това уравнение  $C_{\text{lift}}$  се нарича коефициент на подемната сила (lift force coefficient) и има различни модели за него (модели на Томияма, Сафман-Мей и Лежендре-Магнауде). Найизползваният модел за  $C_{\text{lift}}$  е този на Томияма и той е използван в настоящата симулация. Моделът има вида:

$$C_{\text{lift}} = \begin{cases} \min\{0.288 \tanh(0.121 \operatorname{Re}_{p}); 0.288 \tanh[f(\text{Eo'})]\} & \text{Eo'} \le 4 \\ f(\text{Eo'}) & 4 < \text{Eo'} \le 10 \\ -0.27 & \text{Eo'} > 10 \end{cases}$$
(50)

където функцията *f*(Ео') има вида:

$$f(\text{Eo'}) = 0.00105 \,\text{Eo'}^3 - 0.0159 \,\text{Eo'}^2 - 0.0204 \,\text{Eo'} + 0.474$$
 (51)

Ео' е модифицирания критерий на Ътвьош и е равен на:

$$Eo' = \frac{g \ \Delta \rho \ d_{\rm H}^2}{\sigma} \tag{52}$$

Тук  $\sigma$ , [N/m] е коефициент на повърхностно напрежение между водата и въздуха. При 25 °C стойността на  $\sigma$  е 0,072 N/m, [21].  $d_{\rm H}$  се нарича еквивалентен диаметър и е:

$$d_{\rm H}^2 = d_{\rm b}^{3} \sqrt{1 + 0.163 \,{\rm Eo}^{0.757}} \tag{53}$$

Изразът за критерия на Ътвьош (Eötvös number) в Урав. (53) е:

$$Eo = \frac{g \ \Delta \rho \ d_b^2}{\sigma}$$
(54)

Трябва да се отбележи, че CFX винаги решава пълните транспортни уравнения с члена за времепроизводната. Това означава, че дори при стационарните симулации итеративната процедура се придвижва напред във времето (time marching). Поради тази причина трябва да се въведе и стойност за стъпката във времето. При стационарните симулации тази стъпка може и да не се задава от потребителя, при това положение солвъра сам изчислява стойността ѝ по доста сложен алгоритъм в зависимост от големина на мрежата, скоростта и градиентите на скоростта. Точната процедура е описана в [2]. По този начин решението на стационарните задачи всъщност представлява някакво моментно състояние на системата. Това придвижване напред във времето ще бъде демонстрирано със сегашната симулация. Първо ще бъдат направени 500 итерации, след това още 100 и накрая още 400. На Фиг. 25 е демонстрирано изменението на обемното съдържание на въздух във водата след 500 итерации, както и обемните части на въздуха в колоната. На Фиг. 26 и 27 са същите величини след 600 и съответно 1 000 итерации. От графиките се вижда, че има развитие в обемните части на въздуха между отделните итерации, като през това време общото съдържание на дисперсната фаза се променя незначително. Освен това се вижда как свободната повърхност се разлюлява вследствие от мехурчетата достигащи до нея. Вижда се, че първите мехурчета достигат граничната повърхност около 250-300-тата итерация и след това системата се намира в псевдоустановен режим и симулацията може да се прекрати тогава. Това се вижда най-добре от остатъците на скоростта и налягането (Фиг. 28). Общото времетраене на изчисленията (1 000 итерации) е 4:14 h.



Фигура 25. а) – обемно съдържание на въздух и б) – обемни части на въздуха в колоната след 500 итерации.



Фигура 26. а) – обемно съдържание на въздух и б) – обемни части на въздуха в колоната след 600 итерации.



Фигура 27. а) – обемно съдържание на въздух и б) – обемни части на въздуха в колоната след 1 000 итерации.



Фигура 28. Изменение на остатъците на скоростите и налягането с напредването на итерационната процедура.

На контурните графики (Фиг. 25-28б) отделните мехурчета не се виждат, това е така защото при метода Ойлер-Ойлер двете фази се приемат като две непрекъснати взаимно проникващи се фази, за които трябва да се спазва условието сумата от обемните им части да е единица. Така всъщност се получават локалните обемни части в някакъв обем на колоната. Поради тази причина се казва, че методът Ойлер-Ойлер е дисперсен метод.

Получената стойност за обемното съдържание на въздуха, след 1 000-та итерация е 2,2 %, което съответства добре на получената при експеримента стойност от 2,3 %.

На Фиг. 29 е представена и векторна графика на скоростта на течната фаза.



Фигура 29. Векторна графика на скоростта на водата.

## 3.4.3. Стационарна симулация с отчитане и на другите сили на взаимодействие.

Останалите сили на взаимодействие между мехурчетата въздух и течната фаза и стената на колоната, които могат да се вземат под внимание в CFX са виртуалната масова сила (virtual mass force), силата на взаимодействие между мехурчетата и стената (wall lubrication force) и силата на турбулентна дисперсия (turbulent dispersion force). За съжаление симулациите с тези сили стават разходящи, което довежда до рязко изменение на остатъците, което пък води до препълване на паметта отделена за солвъра от операционната система (memory overflow error). Това естествено води до спиране на симулацията. Ето защо няма да бъдат представени изразите за тези сили, които се интересува от тях може да ги намери в [2] и [3]. Една от възможните причини за тази разходимост на итеративната процедура, е прекомерната сложност на модела, което го прави твърде чувствителен по отношение на различни параметри, гранични и начални условия и прочие. Едно възможно решение за преодоляване на този проблем е да се използва по-фина мрежа, особено ако знаем къде има бърза промяна в градиентите. Но разбира се това ще бъде за сметка на изчислителните усилия необходими за решаването на модела.

#### 3.4.4. Стационарна симулация в преходния хидродинамичен режим.

Понеже барботажната колона е с малък диаметър (40 mm) с увеличаване скоростта на постъпващата в колоната газова фаза колоната преминава от хомогенен, през преходен до периодичен режим на работа. От интерес е да се види дали CFD симулация би се справила с това да предскаже по някакъв начин тази смяна в режимите на работа (това е т.нар. scale-up invenstigation на английски). При обемен дебит от 2 L/min скоростта на газа на входа в колоната е 4,72 m/s (приведената скорост на газовата фаза е 0,039 m/s). При експеримента с тази стойност на разхода нивото на граничната повърхност се колебае в рамките от 32 до 39 mm, което отговаря на обемно съдържание на газовата фаза от 4,0 до 4,9 %. На Фиг. 30 е показано изменението на обемното съдържание с итерациите. Вижда се, че след достигане на псевдоустановеното състояние след около 750-тата итерация, обемното съдържание се колебае в рамките от 4,5 до 5,0 %. На Фиг. 31 е показана контурна графика на обемните части на газовата фаза.



Фигура 30. Обемно съдържание на въздух.



На Фиг.32 са показани аксиалните скоростни профили на водата в централната равнина на колоната за три височини – 0,6; 0,7 и 0,8 m.



От фигурата се вижда, че при височина 60 cm (червената крива) под въздействието на мехурчетата, които са полепнали по стената водата се издига нагоре заедно с тях, докато се спуска надолу в центъра на колоната. Постепенно с повишаване на височината мехурчетата се отделят от стената и преминават към средата, а в последствие и към отсрещната част на колоната (синята крива), което пък довежда до това, че течността се спуска надолу малко надясно от центъра. На височина 80 cm (първоначалната височина на граничната повърхност) профила на течността постепенно се изглажда (зелената крива). Циркулацията на течността се дължи на това, че издигащите се нагоре мехурчета увличат след себе си и течност и за да се запази материалния баланс на водата тя трябва да се спусне надолу. Така се получава сложната картина на хидродинамиката в колоната.

## 3.4.5. Допълнителна симулация.

За да се провери дали смяната на входното гранично условие, от такова за нормална скорост на такова за масов дебит, дава някаква разлика е проведена симулация с това гранично условие. Условията и настройките са същите, като тези от точка 3.4.2.

Получените резултати са аналогични на тези от точка 3.4.2, поради което няма да бъдат представени графично.

#### 3.5. Нестационарна симулация.

Както се вижда от предходните симулации процесите в барботажните колони са нестационарни. Ето защо ще се проведе и една нестационарна симулация. За тази симулация към метода Ойлер-Ойлер се добавя и метода Volume of Fluid (VOF). При VOF се изчислява местоположението на междуфазовата повърхност, като по този начин може да се получи граничната повърхност между мехурчетата и водата, както и да се моделира подобре поведението при свободната повърхност. Теоретично, ако мрежата е много фина могат да се видят мехурчетата с голяма точност. При VOF се моделира повърхностното напрежение между двете фази, ето защо е необходимо да се зададе и стойността на коефициента на повърхностното напрежение  $\sigma$ . За всяка нестационарна симулация е необходимо да се зададе задължително как се изменя стъпката във времето. За конкретната симулация се избира адаптивна стъпка във времето в границите от  $1.10^{-8}$  до  $1.10^{-5}$  s. Стъпката се изчислява, така че да е изпълнено условието на Курант-Фридрих-Леви, т.е.  $C_{\Delta} \leq 1$ . От гледна точка на устойчивостта на дискретизация във времето, а той е с безусловна устойчивост. Но за да бъде симулацията максимално близо до реалните физични условия, това условие е желателно да бъде спазено. Смисълът му е, че при  $C_{\Delta} \leq 1$  имаме информация за скоростта на всяка една флуидна частица във всяка една клетка от мрежата, докато ако  $C_{\Delta} > 1$  това означава, че дадена частица "прескача" толкова клетки от мрежата колкото е  $C_{\Delta}$ между две последователни стъпки във времето. Схемата на дискретизацията във времето е обратна схема (backward scheme) от втори ред. Максималният брой вътрешни итерации в една времева стъпка е 10. Зададеното времетраене на симулацията е 4 s. Данни се записват на всеки 0,05 s. Симулацията се извършва при обемен разход на газовата фаза от 2 L/min, като в предходното изследване.

Времетраенето на изчисленията беше 42 денонощия, като за това време бяха достигнати едва 2 s от симулациоонното време и направени общо над 90 000 итерации. След което симулацията бе спряна. Интересен факт е, че големината на \*.out файла (това е формата на текстовия log файл на CFX) е 407 MB.

Експерименталните данни показват, че общото обемно съдържание на въздух е 4,5 %, а приблизителното време на издигане на мехурчетата е 1,3 s. Съответните данни от тази нестационарна CFD симулация са 4,2 % и 1,1 s. Стойността за времето на издигане на мехурчетата при симулацията се засича от видеоклип направен с всичките данни.



На Фиг. 33 е представено изменението на обемните части на въздуха във времето.

Фигура 33. Изменение на обемните части на въздуха във времето



Фигура 33. Изменение на обемните части на въздуха във времето



Фигура 33. Изменение на обемните части на въздуха във времето

На фигурата макар и с не резки граници могат да се разграничат мехурчета, което е следствие от добавянето на VOF метода.

# 4. Заключение и изводи.

В настоящата дипломна работа е направен литературен обзор на процедурите, моделите и методите на CFD симулациите, както и разширен обзор на литературата от последните 15 години посветена на приложението на CFD за моделиране на барботажни колонни апарати. Изготвена е техническа документация (чертежи и тримерни модели) с изисквания за на лабораторни барботажни колони. Изготвен е пълен комплект закупуване С висококачествени мрежи на ANSYS ICEM CFD за последващи CFD симулации на закупените барботажни колони. Изпълнени са редица числени симулации на ANSYS CFX с една от създадените мрежи. Изследвано е влиянието на различните сили на взаимодействие между въздушните мехурчета от една страна и непрекъснатата фаза (водата) и стените на барботажните апарати от друга страна. Изследвано е още как влияе обемния дебит на захранващия въздух върху хидродинамичния режим в колоната. Всичките тези симулации са стационарни. Извършена е и нестационарна симулация с много малка стъпка във времето, за да бъде симулацията максимално близка до реалните условия. Проведени са експерименти на лабораторната установка за верификация на числените симулации и съответствието между двата вида изследвания е много добро.

От дипломната работа могат да се направят следните по-важни изводи:

- от литературната справка се вижда, че областите на приложение на CFD се увеличават непрекъснато, като се решават все по-сложни задачи;
- непрекъснатото развитие на компютърната техника, както и въвеждането на нови модели, като PBM прави приложението на CFD в областта на многофазните системи (каквито са барботажните колони) все по-голямо; масово навлиза моделирането на 3D барботажни колони, като се увеличава и броят на силите вземани под внимание, освен това се върви към навлизане на все по-тежки от изчислителна гледна точка турбулентни модели, като RSM и LES;
- за коректното и по-бързо CFD моделиране са необходими висококачествени мрежи, каквито са хекса мрежите, които довеждат до по-малка числена дифузия в решението и до по-добра сходимост на итеративната процедура. За съжаление създаването на такива мрежи е изключително трудоемко дори за несложни геометрии, каквито са изследваните колони. А ако геометрията е по-сложна, дори може да се стигне до ситуация, при която е невъзможно създаването на хекса мрежа;

- СFD симулациите на многофазни системи са значително по-трудни от изчислителна гледна точка, защото се добавят допълнителни уравнения за всяка от фазите;
- допълнителните уравнения, както и многобройните сили на взаимодействие между отделните фази правят моделите изключително силно параметрично зависими, като дори и малка промяна на някое условие (гранично или начално) или промяна в структурата на моделите, води до неустойчивост на решението;
- очаквано турбулентния SST модел, дава много добри резултати, като добавеното изчислително усилие не е голямо, ето защо се предлага за първи избор в повечето случаи;
- многофазните процеси газ-течност по природа са нестационарни и е желателно да бъдат моделирани, като такива;
- необходимо е наличието на огромни изчислителни ресурси за моделирането на нестационарността при многофазните системи, на практика неизползването на паралелни архитектури обрича симулациите с големи мрежи и малки стъпки във времето;
- като цяло може да се твърди, че CFD се справя много добре със задачата да моделира многофазни системи, като това се потвърждава и от сравнението с експериментални данни.

## Използвана литература:

- [1]. ANSYS CFX-Solver Modeling Guide, Release 14.0, ANSYS Inc, 2011
- [2]. ANSYS CFX-Solver Theory Guide, Release 14.0, ANSYS Inc, 2011
- [3]. ANSYS FLUENT Theory Guide, Release 14.0, ANSYS Inc, 2011
- [4]. Bhole, M. R., Joshi, J. B., Ramkrishna, D., 2008. CFD simulation of bubble columns incorporating population balance modeling, Chemical Engineering Science 63, 2267-2282
- [5]. Buwa, V. V., Deo, D. S., Ranade, V. V., 2006. Eulerian–Lagrangian simulations of unsteady gas–liquid flows in bubble columns. International Journal of Multiphase Flow 32, 864-885
- [6]. Buwa, V. V., Ranade, V. V., 2002. Dynamics of gas–liquid flow in a rectangular bubble column: experiments and single/multi-group CFD simulations. Chemical Engineering Science 57, 4715-4736
- [7]. Buwa, V. V., Ranade, V. V., 2003. Mixing in bubble column reactors: role of unsteady flow structures. The Canadian Journal of Chemical Engineering 81, 402-411
- [8]. Buwa, V. V., Ranade, V. V., 2004. Characterization of dynamics of gas-liquid flows in rectangular bubble columns. AIChE Journal 50, 2394-2407
- [9]. Chen, P., Sanyal, J., Dudukovic, M. P., 2004. CFD modeling of bubble columns flows: implementation of population balance. Chemical Engineering Science 59, 5201-5207
- [10]. Cheung, S. C. P., Yeoh, G. H., Tu, J. Y., 2008. Population balance modeling of bubbly flows considering the hydrodynamics and thermomechanical processes. AIChE Journal 54, 1689-1710
- [11]. Chittipotula, T., Janiga, G., Abdelsamie, A., Hagemeier, T., Thevenin, D., Investigation of bubble dynamics in a rectangular bubble column by using CFD combined with PBM. ICMF, Jeju, Republic of Korea, May 26-31, 2013
- [12]. Deen, N. G., Mudde, R. F., Kuipers, J. A. M., Zehner, P., Kraume, M., 2011, Wiley-VCH. Bubble Columns in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 7<sup>th</sup> edition
- [13]. Elena Diaz, M., Iranzo, A., Cuadra, D., Barbero, R., Montes, F. J., Galan, M. A., 2008. Numerical simulation of the gas–liquid flow in a laboratory scale bubble column. Influence of bubble size distribution and non-drag forces. Chemical Engineering Journal 139, 363-379
- [14]. Elena Diaz, M., Montes, F. J., Galan, M. A., 2009. Influence of the lift force closures on the numerical simulation of bubble plumes in a rectangular bubble column. Chemical Engineering Science 64, 930-944
- [15]. Ekambara, K., Dhotre, M. T., Joshi, J. B., 2005. CFD simulations of bubble column reactors: 1D, 2D and 3D approach. Chemical Engineering Science 60, 6733-6746

- [16]. Joshi, J. B., 2001. Computational flow modelling and design of bubble column reactors. Chemical Engineering Science 56, 5893-5933
- [17]. Kulkarni, A. A., Ekambara, K., Joshi, J. B., 2007. On the development of flow pattern in a bubble column reactor: Experiments and CFD. Chemical Engineering Science 62, 1049-1072
- [18]. Laborde-Boutet, C., Larachi, F., Delsart, O., Schweich, D., 2009. CFD simulation of bubble column flows: Investigations on turbulence models in RANS approach. Chemical Engineering Science 64, 4399-4413
- [19]. Monahan, S. M., Vitankar, V. S., Fox, R. O., 2005. CFD predictions for flow-regime transitions in bubble columns. AIChE Journal 51, 1897-1923
- [20]. Paschedag, A. R., 2002, Wiley-VCH. Computational Fluid Dynamics in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 6<sup>th</sup> edition
- [21]. Poling, B. E., Prausnitz, J. M., O'Connell, J. P., 2001, McGraw-Hill. The Properties of Gases and Liquids. 5<sup>th</sup> edition
- [22]. Rampure, M. R., Buwa, V. V., Ranade, V. V., 2003. Modelling of gas-liquid/gas-liquidsolid flows in bubble columns experiments and CFD simulations. The Canadian Journal of Chemical Engineering 81, 692-706
- [23]. Ranade, V. V., Tayalia, Y., 2001. Modelling of fluid dynamics and mixing in shallow bubble column reactors: influence of sparger design. Chemical Engineering Science 56, 1667-1675
- [24]. Ranade, V. V., Utikar, R. P., 1999. Dynamics of gas-liquid flows in bubble column reactors. Chemical Engineering Science 54, 5237-5243
- [25]. Sanyal, J., Vasquez, S., Roy, S., Dudukovic, M. P., 1999. Numerical simulation of gasliquid dynamics in cylindrical bubble column reactors. Chemical Engineering Science 54, 5071-5083
- [26]. Sommerfeld, M. 2004, Springer-Verlag. Bubbly Flows: Analysis, Modelling and Calculation
- [27]. Tabib, M. V., Roy, S. A., Joshi, J. B., 2008. CFD simulation of bubble column An analysis of interphase forces and turbulence models. Chemical Engineering Journal 139, 589-614
- [28]. Wang, T., Wang, J., Jin, Y., 2006. A CFD-PBM coupled method for gas–liquid flows. AIChE Journal 52, 125-140
- [29]. Zehner, P., Kraume, M., 2002, Wiley-VCH. Bubble Columns in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 6<sup>th</sup> edition

[30]. Zhang, D., Deen, N. G., Kuipers, J. A. M., 2006. Numerical simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column: A study of closures for turbulence and interface forces. Chemical Engineering Science 61, 7593-7608