

Heterokatalitikus rendszerek CFD alapú modellezése

Rádi Gy., Varga T., Dr. Chován T.

Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

8200 Veszprém, Egyetem utca 10

ÖSSZEFOGLALÁS

A vizsgálatom tárgya egy gáz-szilárd fázisú, állóágyas, heterogén-katalitikus, csőköteges reaktor. A célom a reaktormodelljének fejlesztése, aminek során a már készen álló kvázihomogén fázisú modellt, kétfázisú modellé alakítom, amely már alkalmassá válik az áramló gázhalmazállapotú közeg és a katalizátor szemcse között lejátszódó transzportfolyamatok leírására. Ehhez egy CFD (computational fluid dynamics) szoftvert, a COMSOL Multiphysics programcsomagot használtam. A modellben szereplő ismeretlen paramétereket a valós fizikai rendszeren szolgáltatja. A megalkotott szemcsemodellt a COMSOL Multiphysics-MATLAB Interface segítségével exportálok a MATLAB programba, ahol annak beépített függvényei segítségével megoldható egy katalizátor ágy felépítése. Legfőbb előnye ennek a struktúrának a hardver kapacitás drasztikus csökkentése.

(Kulcsszavak: heterogén-katalitikus, reaktormodellezés, CFD , kétdimenziós, kétfázisú.)

Bevezetés

A munkánk tárgya az ipari gyakorlatban igen széles körben alkalmazott töltetes csőreaktor. A Pannon Egyetem Folyamatmérnöki Intézeti Tanszékén már a 90-es évek óta folyik ezen a területen kooperációs kutatás, melynek során ipari szakemberekkel együttműködve törekszünk a reaktort minél pontosabban leíró matematikai modell megalkotására az iparban jelentkező problémák megoldása céljából. A munkához egy működő ipari technológiai rendszeren gyűjtött mérési adatokat és gyakorlati tapasztalatokat használtuk fel. A vizsgált reaktor működésének leírására az eddigiekben több szimulátor készült el különböző jellegű problémák megoldására (kvázi egyfázisú stacioner modell – elfutás vizsgálatok; kvázi egyfázisú dinamikus modell – reaktorindítási kísérletek; kétfázisú dinamikus modell - a szemcse és a gázfázis között lejátszódó transzport jelenségek sebesség intenzifikálásának vizsgálata). Az eddig megalkotott modellek egy dimenzióban, a reaktor szimmetria tengelye mentén írták le a reaktorban kialakuló állapotváltozó profilokat. Jelen munka célja, hogy a kétfázisú dinamikus modellt továbbfejlesztve lehetővé váljon a reaktor sugara mentén kialakuló változások vizsgálata. Amennyiben egy vállalat fejlesztési szándékkal pl. kapacitást akar növelni, vagy csak a konverzió növekedése érdekében változtat a működési paramétereken, a modell alkalmas még a fizikai bekövetkezés előtt szimulálni és feltárni, milyen eredmények várhatók a változtatás(ok) következményeként. Ezáltal pénz és idő takarítható meg oly módon, hogy egyszerűbbé válik a technológiát kezelő személyzet feladata, a tervezés folyamata, ill. üzemzavarok szimulálásával, az azokra való felkészülést is segítető. A modellt az elfutás jelenségének vizsgálatára és annak előrejelzésére is alkalmazni kívánjuk. A reaktorok elfutásának jelensége egy gyakori probléma az ipari technológiai folyamatokban. Az elfutás lényege a technológia állapotjelzőinek hirtelen bekövetkező, ugrásszerű megnövekedése, ezek közül az állapotjelzők közül exoterm reaktorok esetén a leginkább kritikus a hőmérséklet. A reaktorelfutás megfelelő időben történő jelzése gazdasági, technológiai és biztonságtechnikai szempontból is rendkívül fontos. Az általunk vizsgált

reaktorban üzemszerűen bekövetkezik a reaktor elfutás jelensége, köszönhetően az exoterm reakció lejátszódásának és a reaktor kialakításának. Az utóbbi időben viszont fontos kérdéssé vált egy újabb lehetséges üzemeltetési tartományok körülhatárolása, ugyanis a magas hőmérséklet eredményeképpen a katalizátorágy öregedése a vártnál gyorsabban megy végbe. Jelenleg a MATLAB nyelven készült modell már megfelelőnek mondható, de a vizsgálandó jelenségek kellően pontos leírására még nem alkalmas.

A munkánk célja, ennek a modellezési problémának részben új megközelítése volt. Az egyszerű kinetikai modell alkalmazása helyett egy katalizátor szemcse modelljét implementáltuk egy FEM (végelem) megközelítést alkalmazó programkeretben. Az így megalkotott szemcsemodellt felhasználva tetszőleges méretű szemcsékből álló katalizátorágy építhető fel. Mivel ez idáig elkészült reaktor szimulátorok MATLAB programnyelven íródtak, ezért célszerűnek láttuk, hogy a szemcsemodellt felhasználva MATLAB felületen készítsük el a tervezett programot, amely alkalmas a katalizátorágyban lejátszódó áramlási és termodinamikai viszonyok vizsgálatára.

Az alkalmazott szoftver a COMSOL Multiphysics program, amellyel leképezhetők a katalizátor szemcsében és környezetében áramló, reagáló fázisok komponens-, hő- és impulzusrétege. Ez követően az első katalizátorágy modell létrehozását MATLAB felületen módosított katalizátor szemcse modellekkel hozzuk létre. A MATLAB segítségével a különböző méretű és geometriájú katalizátor szemcsemodellek összekapcsolásával végtelen számú eloszlás adható meg a katalizátor szemcsék elhelyezkedésére a katalizátorágyban, ill. alkalmas különböző optimalizálási feladatok elvégzésére. Jelentősége ennek a megoldásnak, hogy a COMSOL Multiphysics lehetőséget biztosít különböző alakú és méretű katalizátorok modellezésére. Az említett modelleket az igény szerint variálva, és MATLAB felületen módosítva egy olyan modellezési környezetet kapunk, amely alkalmas sok különböző katalizátorágy leírására, figyelembe véve a szemcsék alakját és tulajdonságait is. Illusztrációként a katalizátorágy modell első változatával elvégzett vizsgálatok eredményei kerülnek bemutatásra.

MODELL IMPLEMENTÁLÁS ÉS VIZSGÁLAT

A vizsgált ipari reaktor egyszerűsített képe a 1. ábrán látható. A reaktor egy függőleges elhelyezésű henger, melyben nagyszámú függőleges cső található, csőkötegszerűen. A szilárd katalizátor (X) a csövekben kerül elhelyezésre, ezeken áramoltatják át a gáz halmazállapotú reagenseket (A, B). A betáplálás reaktor tetején, a terméklevétel pedig a reaktor alján történik. A lejátszódó reakció exoterm hőszínezetű, vagyis a katalizátorágyat működés közben hűteni kell, ezt a csövek közötti térben áramoltatott hűtőközeggel valósítják meg. Az áramok jelmagyarázata a Mellékletben megtalálható.

(1. ábra helye!)

A reakció több elemi lépésből áll, ezek a részfolyamatok: a diffúzió a főtömegben, adszorpció a katalizátor felületén, diffúzió a katalizátor felületén kialakult filmrétegben, a reakció a filmrétegben, diffúzió a filmrétegben, deszorpció, diffúzió a főtömegben. Abban az esetben, ha részfolyamatok sebességének vizsgálatára nincs szükségünk, elegendő egy bruttó reakció (1) és azon alapuló reakciósebességi összefüggés bevezetése (Csanády, 2007):



A reakció jellemzői:

Egyensúlyra vezető reakció

Exoterm

Mólszámcsökkenéssel jár

Heterogén-katalitikus

A reakció kinetikája

A reakciósebesség és a reakció egyensúlyi állandó leírása irodalmi adatok alapján történt,

illetve az irodalmi kutatásokat követően ismeretlen paraméterek meghatározása paraméter identifikáció technika alkalmazásával végeztük. A reakció egyensúlyi állandót (2) a hőmérséklet függvényében egy exponenciális összefüggéssel írjuk le (Varga, 2007)

$$\ln K = A_e + \frac{B_e}{T} \quad (2)$$

A reakciósebesség leírására számos összefüggés található az irodalmi forrásokban, a dolgozat készítésekor több egyenletet is megvizsgáltunk. Az első egyenlet (3) egy kísérleti adatok alapján meghatározott reakciósebesség, melyet szén katalizátorral töltött csőben mértek ki .

$$r = \frac{e^{-\left(\frac{2,500}{T}-6,34\right)} p_A \cdot p_B - \frac{p_A}{K}}{\left[1 + e^{\left(\frac{2,500}{T}-7,32\right)} \cdot p_B + e^{\left(\frac{8,040}{T}-26,05\right)} \cdot p_C\right]^2} \quad (3)$$

A következő vizsgált reakciósebességre vonatkozó összefüggés (4) szintén egy kísérletileg meghatározott egyenlet.

$$r = 9477 \cdot \exp\left(\frac{-18.25 \cdot 10^3}{R \cdot T}\right) \cdot p \cdot \frac{n_A^{0.75} \cdot n_B^{0.25}}{n_{sum}} \quad (4)$$

A (3) reakciósebességi egyenletet a (5) paraméteres formában is megvizsgáltuk, az ismeretlen paraméterek értéke identifikációs módszerrel határozható meg.

$$r = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot T}\right) \cdot p \cdot \frac{n_B^{a_B} \cdot n_A^{b_A}}{n_{sum}} \quad (5)$$

A negyedik reakciósebességet leíró egyenlet a Langmuir-Hinshelwood kinetikán alapul, melynek ismeretlen paraméterei szintén identifikációval határozhatóak meg.

$$r = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot T}\right) \cdot \frac{p_A^{n_A} \cdot p_B^{n_B} - \frac{p_C}{K \cdot p_A^{1-n_A} \cdot p_B^{1-n_B}}}{1 + p_C^{n_D}} \quad (6)$$

A dolgozatban a modell megalkotásához a bemutatottak közül Langmuir-Hinshelwood kinetika alapján felírt reakciósebességi formát alkalmaztuk, mert elméletileg is megalapozott, gyakran alkalmazzák heterogén-katalitikus reakciókra, egyensúlyban nullává válik, illetve az

ezzel kapott eredmények illeszkednek a legjobban a valós reaktorból származó mérési adatokhoz.

MATLAB modell bemutatása

A modell elkészítésével célunk az volt, hogy képet kapjunk az elfutással szoros kapcsolatba hozható reaktor instabil tartományának időbeli alakulásáról (T. Varga, 2007). Első közelítésben a reaktor működésének szimulációjára egyfázisú, egydimenziós modellt alkottunk, amely alkalmas a feladat megoldására. A modell egyenletekben szereplő ismeretlen paraméterek meghatározását a MATLAB nemlineáris, korlátos szélsőérték kereső algoritmusát alkalmazva végeztük.

A modellezés szempontjából a katalizátorágyként funkcionáló csövek, a szimmetria-viszonyok és az azonos méreteik miatt egyetlen csővel helyettesíthetők. A reaktor egy állapotának definiálásához az alábbi hét változó ismeretére van szükség:

a komponensek koncentrációi ($c_A^G(t,x)$; $c_B^G(t,x)$; $c_C^G(t,x)$);

a reaktor belső-, illetve köpenyterének hőmérséklete ($T^G(t,x)$; $T^H(t,x)$);

a gázhalmazállapotú reagensek nyomása és térfogatárama ($p^G(t,x)$; $B^G(t,x)$).

A felsorolt hét állapotváltozó számítására felírt mérlegegyenletek sorban a következők:

$$V^G \cdot \frac{\partial c_i^G}{\partial t} + \frac{\partial (B^G \cdot c_i^G)}{\partial x} = -r^G \quad / i = \{A; B; C\} \quad (7)$$

$$V^G \cdot \rho^G \cdot c_p^G \cdot \frac{\partial T^G}{\partial t} + B^G \cdot \rho^G \cdot c_p^G \cdot \frac{\partial T^G}{\partial x} = V^S \cdot r^G \cdot (-\Delta H_r) - U^{GH} \cdot A^{GH} \cdot (T^G - T^H) \quad (8)$$

$$V^H \cdot \rho^H \cdot c_p^H \cdot \frac{\partial T^H}{\partial t} + B^H \cdot \rho^H \cdot c_p^H \cdot \frac{\partial T^H}{\partial x} = U^{GH} \cdot A^{GH} \cdot (T^G - T^H) \quad (9)$$

$$\frac{dp^G}{dx} = -2 \cdot f \cdot \frac{\rho^G \cdot (B^G)^2}{d_p \cdot (A)^2} \cdot f_c \quad (10)$$

$$\frac{dB^G}{dx} = -\frac{1}{V^G} \cdot \frac{r^G}{\sum_{i=\{A;B;C\}} c_i^G} - \frac{B^G}{p^G} \cdot \frac{dp^G}{dx} - \frac{U^{GH} \cdot A^{GH} \cdot (T^G - T^H)}{T^G \cdot c_p^G} \quad (11)$$

Az (7) parciális differenciálegyenletben szereplő reakciósebesség számításához formailag a

már említett Langmuir-Hinselwood reakciókinetikával meg-egyező összefüggést alkalmaztunk:

$$r^G = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{R \cdot T^G}\right) \cdot \tanh(A_1 \cdot x^{A_2}) \cdot \frac{(p_A^G)^{n_A} \cdot (p_B^G)^{n_B} - \frac{p_C^G}{K \cdot (p_A^G)^{1-n_A} \cdot (p_B^G)^{1-n_B}}}{1 + (p_C^G)^{n_C}}, \quad (12)$$

ahol p_i^G a komponensek parciális nyomását; n_i állandó a parciális nyomások hatványkitevőit; K pedig a reakció egyensúlyi állandóját jelöli, amit

$$K = \exp\left(K_1 + \frac{K_2}{T^G}\right) \quad (13)$$

összefüggés alapján határoztunk meg. A szorzatban szereplő tanh-tag lehetőséget nyújt a katalizátor, reaktor hossza mentén kialakuló aktivitás-eloszlás reakciósebességre gyakorolt hatásának figyelembe-vételére, illetve a katalizátor-öregedés a reaktor teljesítőképességére kifejtett hatás szimulációjára is.

A nyomásváltozás számítására felírt (4) közönséges differenciálegyenletben szereplő f tag számításához az Ergun-egyenlet az alábbi módosított változatát alkalmaztuk:

$$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \cdot \left(1.75 + 150 \cdot \frac{1-\varepsilon}{\text{Re}}\right), \quad (14)$$

ahol ε a katalizátorágy szabadtérfogati tényezője.

A modell megoldásához szükség van a reakciósebesség számítására felírt (12) összefüggésben szereplő állandók ($k_0; E_A; n_A; n_B; n_C; A_1; A_2$), illetve a reaktor belső- és köpenytere közötti hőátadási folyamat, átadási tényezőjének (U^{GH}) meghatározására. A modell további részletes leírása (Varga, 2007) hivatkozású cikkben megtalálható

COMSOL Multiphysics modellezés menete

A modellezés menetének első lépése a programban összegyűjtött különböző jellegű folyamatok leírására alkalmas összefüggésekből a modellalkotáshoz szükséges egyenletek kiválasztása. Második lépésben megalkotom a kívánt geometriai alakzatot. Ezután jön az egyenletekhez szükséges konstansok, ill. paraméterek megadása, amelyek az anyagra

jellemző tulajdonságok, vagy azokból számolhatók. Definiálva a peremfeltételeket is, már csak a számolandó elemek milyenségét, mennyiségét és felosztását kell megadni (mesh) és a numerikus megoldó algoritmust kiválasztani. A futtatás után az eredmények különböző 2 ill. 3 dimenziós ábrán megjeleníthetők, és az eredmények numerikusan is kiértékelhetők.

Paraméterek, előzetes számítások

Az első lépés a modell készítéséhez a szükséges adatok összegyűjtése, illetve ezekből kiindulva az előzetes számítások elvégzése, melyek a modell egyenletek megoldásához szükségesek lesznek. A paramétereket a későbbi összehasonlítás kedvéért a már említett (*Varga, 2007*) cikkből veszem. Ezáltal a saját megoldásom kap egy viszonyítási alapot, melynek a megközelítése a cél. A szükséges konstansok és összefüggések a Mellékletben szerepelnek.

Modell implementálása és megoldása

A modellezés következő lépése a már említett dekomponálás, amely eredményét jelen esetben a 6.ábra szemléltet.

A megalkotott szemcse modell megoldásához a COMSOL Multiphysics programcsomagot használtam (*T. Varga, 2007*). Ahogy említettem interaktív grafikus felület lehetővé teszi különféle alakú és komplexitású objektum modelljének leképezését. Az objektum létrehozásakor lehetőség van a szimmetria viszonyok figyelembevételével egyszerűsíteni a megoldandó egyenletrendszer méretét és ezzel csökkenteni a megoldáshoz szükséges időt. A szemcse alakját egy gömbbel közelítettük, ami a szimmetria viszonyok léte miatt elég 2 dimenzióban

(2. ábra helye!)

ábrázolni. A szemcsét tehát egy kör szimbolizálja, és a körülötte lévő téglalap a közvetlen környezetét.

Ez a feltételekben leírtak szerint a reaktor belső terében, közvetlen a betáplálásnál lévő

katalizátor szemcsét ábrázol, vagyis a stacioner állapot feltételezése miatt nem veszem figyelembe az egyéb katalizátor szemcsék jelenlétét, csak egyetlen szemcsét és a körülötte kialakuló áramlási, hő és koncentráció profilokat. A kémia reakciónak a katalizátor térfogat ad helyet, így egyben komponensnyelő és forrás, és a reakció exoterm volta miatt hő forrás is. A szemcse környezetét lezáró falat a hőmérleg szempontjából szigeteltnek, az impulzus mérleg szempontjából „tapadónak”, vagyis olyanak, amelyen nem tud a közeg sebességveszteség nélkül haladni. Az áramlási kép leírására a Navier-Stokes egyenletet használtam (16), összenyomhatatlan közeg impulzus változásait írja le. A hőmérlegnél (17) figyelembe vettem a hő áramlás és vezetési tagokat, illetve a katalizátor szemcsében lejátszódó reakciót. 18-20 összefüggések a komponens mérlegeket leíró egyenletek.

Impulzus mérleg

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \quad (15)$$

$$\rho \cdot u \cdot \nabla u = \nabla \cdot [p \cdot I + \eta \cdot (\nabla u + (\nabla u)^T)] + F \quad (16)$$

$$\nabla u = 0$$

Hőmérleg

$$\nabla(-k\nabla T) = Q - \rho \cdot C_p \cdot u \cdot \nabla T \quad (17)$$

Anyagmérleg

$$\nabla(-D \cdot \nabla cA) = R - u \cdot \nabla cA \quad (18)$$

$$\nabla(-D \cdot \nabla cB) = R - u \cdot \nabla cB \quad (19)$$

$$\nabla(-D \cdot \nabla cC) = R - u \cdot \nabla cC \quad (20)$$

A modell implementálását követően egy hálót kell generálni az objektumra, amelynek elemei lehetnek azonos alakúak és méretűek, de a program lehetőséget ad az objektum bizonyos részein az elemek sűrítésére, illetve a kevésbé kritikus részeken a ritkításra, ezzel is gyorsítva a számítást. A háló generáláskor a reaktor fal és a katalizátor szemcse mentén sűrűbbre állítottam a felosztást, ahogy ez a 3. ábrán is látszik.

(3. ábra helye!)

COMSOL Multiphysics -MATLAB kapcsolat megvalósítása

Miután meghatároztuk a modellezendő objektum geometriáját, implementáltuk a vizsgálandó állapotváltozókat leíró mérlegegyenleteket, rögzítettük a szükséges állandókat, algebrai kifejezéseket ill. a peremfeltételeket, a szimuláció elvégezhető.

A COMSOL Multiphysics program egy korábban a MATLAB programcsomag egyik eszköztára volt, a PDE Toolbox 1.0, majd FEMLAB 1.0 ill. 2.0 néven. Továbbfejlesztése során már önállóan alkalmazható programmá vált, és így fejlődött tovább. Nem teljesen feledve gyökereit a programban lehetőség nyílik MATLAB felülettel való kommunikációra.

A kapcsolat előnye az, hogy a már bemutatott és MATLAB-ban elkészített modellel összekapcsolva saját vizsgálatok elkészítésére használhatjuk a COMSOL modellünket.

A modellek összekapcsolására két módszert próbáltunk eddig. A COMSOL Multiphysics lehetőséget nyújt a modell M-fileba történő exportálására (*R. W. Lewis, 2004*). Ez egy egyszerűbb, egy-két mérlegegyenletes és kevés paraméteres probléma megoldásánál előnyös, mert könnyen átlátható algoritmust kapunk, ha MATLAB felületen megnyitjuk. Komoly segítségünkre volt ez a módszer a később létrehozott algoritmus elkészítésében, ugyanis nem állt rendelkezésünkre egyéb forrás a Multiphysics által használt parancskészlet megismerésére. Ennél a módszernél szembesültünk azzal, hogy a mesh finomítása iteratív módon történik az eredmény hibája alapján, ami sajnos a mi problémánk bonyolultsága miatt a futási idő nagyságát jelentősen megnövelve hátráltatta a munkánkat.

A második lehetőség a COMSOL programban létrehozott modell exportálása egy úgynevezett FEM (végeelem) struktúra formájában, amely egy átlátható hierarchia szerint tartalmazza az összes egyenletet és változót illetve konstanst, ami a számításhoz kell. Az első módszerből szerzett tapasztalatok alapján sikerült átlátni és megismerni az egyes műveletek parancsait, és így lehetőség nyílt ennek a struktúrának a kedvünk szerinti módosítására (*M. Kunczmann,*

2008).

EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉS

Az eddig elkészített modell működésének elemzésére kétféle vizsgálatot végeztünk el. Az első arra irányul, hogyha egy fix mennyiségű katalizátort, és az egyes szemcséket gömb geometriával közelítjük, és darabolni kezdjük, vagyis kisebb gömbökre osztjuk, mi történik. Elméletileg a katalizátor osztásának növekedésével ugyanakkora térfogathoz nagyobb felület párosul, vagyis nő a katalizátor felületén lévő aktív helyek száma, miáltal nő a konverzió. A konverzió növekedése maga után vonzza hőmérséklet növekedését, de csökken a sebesség az egymás után helyezett katalizátor szemcséken történő nyomásesés miatt. A 4.-5. ábrán láthatóak az egyes tulajdonságok különböző osztottságú katalizátor mennyiségek profiljai. Látható, hogy ahogy nő az osztottság, egyre hosszabbak a profilok. A modell a várakozásoknak megfelelően viselkedett, ugyanis az osztottság növekedésével csökken az alapanyag mennyisége, ezzel párhuzamosan nő a termék mennyisége, nő a véghőmérséklet, és csökken a kilépő áram sebessége. Az így kapott eszköz alkalmas lehet a szemcsék méretének, illetve méreteloszlásának optimalizálására, ugyanis az áramlási sebesség és a termék mennyisége között megfogalmazható egy optimalizálási probléma, de ez előtt megbízható katalizátorágy modellt kell megalkotnunk.

(4. ábra helye!)

(5. ábra helye!)

Második vizsgálatnál állandóra, ötre vettük a szemcseszámot és a szemcseméret változása függvényében vizsgáltuk a tulajdonságok változását. Azt prognosztizáltuk, hogy a szemcseméret növekedésével növekedni fog a termék koncentráció és a hőmérséklet, ezzel párhuzamosan csökken az alapanyag koncentráció és a közegsebesség. Az első három

állításunk beigazolódni látszik, ahogy ez az alapanyag a szemcseméret növekedéssel párhuzamosan fogy, a termék keletkezik, a hőmérséklet is emelkedik, ahogy ezt a 6.-7. ábra mutatja. A sebességnél minimális változás tapasztalható, és összevetve a ábrákkal, elmondható, hogy a modell jelenlegi részletessége mellett jelentősen a szemcsék számára érzékeny.

(6. ábra helye!)

(7. ábra helye!)

KONKLÚZIÓ

COMSOL Multiphysics alkalmas a reaktor cső és a katalizátor szemcse modell implementálására és szimulációk elvégzésére. Tulajdonságaiból adódóan alkalmas arra, hogy egy, egyelőre, gömb alakú szemcsén az impulzus-, hő- és komponensáramlás, átadás, forrás jelenségét a megfelelő leíró egyenletekkel közelítse. Az így kapott modellt a COMSOL Multiphysics MATLAB programmal létesített kapcsolatán keresztül egy könnyen programozható felületre vihető. Így, mint egy beépített függvényként alkalmazható a CFD modell a MATLAB-ban felépített modellben. A leírt módon a katalizátorágy részletesebb szimulációja lehetséges ebben a környezetben, és az elvégzett vizsgálatok biztatóak a jövőbeni fejlesztésére nézve.

A megalkotott szemcsemodell megoldásához a COMSOL Multiphysics programcsomagot használjuk továbbra is. A MATLAB felületen tovább fejlesztenénk az algoritmust, megoldva a szemcseméret változtatásának automatizálását. Ehhez tovább kell bővíteni az ismereteimet a COMSOL belső működésének témakörében, mivel annak ellenére, hogy a COMSOL Multiphysics számos GUI felülettel segíti a modellezőket, egyben korlátozza a mozgásteret, így szükséges lesz továbbra is a MATLAB-bal való kapcsolat kiaknázása. További terveim

között szerepel a lineáris leképezés után a második dimenzió, vagyis az egymás mellett lévő katalizátor szemcsék között lévő kölcsönhatások leírására, ezzel is a modell pontosítása. Egyelőre csak átlagtulajdonságokkal számolt a modell, de később a teljes peremet szeretném majd összekapcsolni.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetet mondunk a TAMOP-4.2.2-08/1/2008-0018 (Élhetőbb környezet, egészségesebb ember - Bioinnováció és zöldtechnológiák kutatása a Pannon Egyetemen, MK/2) projekt anyagi támogatásáért.

JELMAGYARÁZAT

1. ábra

| | |
|---|------------------|
| Hűtővíz térfogatárama | B^W |
| Hűtővíz belépő-kilépő hőmérséklete | T_{in-out}^W |
| Gáz belépő-kilépő térfogatárama | B_{in-out}^G |
| Gáz belépő-kilépő hőmérséklete | T_{in-out}^G |
| Gáz belépő-kilépő i-edik komponens koncentrációja | $c_{i in-out}^G$ |
| Gáz belépő-kilépő nyomása | p_{in-out}^G |

Kétdimenziós – egy fázisú modell

Összefüggések

| | | |
|-------------------------------|------|--|
| Reakció sebesség | rate | $Kc \cdot c_1 \cdot c_2$ |
| Reakció sebességi együttható | | $K_0 \cdot \exp(-E_a/(R \cdot T)) \cdot (PCO^{na} \cdot PCI_2^{nb} \cdot PCOCl_2 / (Kr \cdot PCO^{(1-na)} \cdot PCI_2^{(1-nb)} \cdot (1 + PCOCl_2^{nc})))$ |
| A komponens parciális nyomása | PA | $1e-005 \cdot c_1 \cdot R \cdot T$ |
| B komponens parciális nyomása | PB | $1e-005 \cdot c_2 \cdot R \cdot T$ |
| C komponens parciális nyomása | PC | $1e-005 \cdot c_3 \cdot R \cdot T$ |
| Kinetikai együttható | Kr | $\exp(A_e + B_e/T)$ |

Konstansok

| | | | |
|------------------------------------|-----|-------------------------|----------------------|
| Betáplálási hőmérséklet | T0 | 311 | K |
| Reakciósebességi állandó | K0 | 7,73252*1000 | mol/m ³ s |
| Reakció hő | Ea | 25290,6 | J/mol |
| Kinetikai konstans | na | 1 | |
| Kinetikai konstans | nb | 1 | |
| Kinetikai konstans | nc | 1 | |
| Entalpia változás | dH | -112100 | J/mol |
| Gáz állandó | R | 8,314 | J/mol*K |
| Kinetikai konstans | Ae | -7,01 | |
| Kinetikai konstans | Be | 4800 | |
| A komponens kezdeti koncentrációja | cA | 28 | mol/m ³ |
| B komponens kezdeti koncentrációja | cB | 56 | mol/m ³ |
| A komponens diffúziós állandója | DA | 2,09E-06 | m ² /s |
| B komponens diffúziós állandója | DB | 2,09*10 ⁽⁻⁶⁾ | m ² /s |
| Kezdeti nyomás | p0 | 150000 | Pa |
| Kezdeti radiális sebesség | u0 | 0 | m/s |
| Kezdeti axiális sebesség | v0 | 0,5 | m/s |
| Viszkozitás | eta | 1,00E-05 | Pas |
| Sűrűség | ro | 30 | kg/m ³ |
| Hővezetési tényező | kT | 0,05 | W/(m*K) |
| Hő kapacitás | CpT | 300 | J/kgK |
| A C komponens diffúziós állandója | DC | 8,79E-07 | m ² /s |
| Az A komponens moláris tömege | MA | 28 | g/mol |
| Az B komponens moláris tömege | MB | 71 | g/mol |
| Az C komponens moláris tömege | MC | 99 | g/mol |
| Az A komponens sűrűsége | roA | 1,145 | g/dm ³ |
| Az B komponens sűrűsége | roB | 3,2 | g/dm ³ |
| Az C komponens sűrűsége | roC | 4,248 | g/dm ³ |

Kétdimenziós – két fázisú modell

Összefüggések

| | | | |
|------------------------------------|------|------------------------------|----------------------|
| Az A komponens diffúziós állandója | DA | $1e-11*T^2+4e-9*T-5e-7$ | m ² /s |
| Az B komponens diffúziós állandója | DB | $1e-11*T^2+1e-9*T-2e-8$ | m ² /s |
| Az A komponens sűrűsége | rhoA | $17.44-0.0416*T+3e-5*T^2$ | kg/m ³ |
| Az B komponens sűrűsége | rhoB | $44.17-0.1054*T+8e-5*T^2$ | kg/m ³ |
| Az A komponens viszkozitása | muA | $2e-6+6e-8*T-2e-11*T^2$ | Pas |
| Az B komponens viszkozitása | muB | $-8e-7+5e-8*T-1e-11*T^2$ | Pas |
| Az A komponens hőkapacitása | cpA | $1067.7-0.2166*T+0.0004*T^2$ | J/kgK |
| Az B komponens hőkapacitása | cpB | $393.08+0.3773*T-0.0003*T^2$ | J/kgK |
| Reakció sebesség | kp | $0.7*\exp(-24000/(8.314*T))$ | m ³ /mols |

| | | | |
|------------------------------------|-------|--|-------------------|
| Az C komponens diffúziós állandója | DC | $1e-11 \cdot T^2 + 2e-9 \cdot T - 3e-7$ | m ² /s |
| Az C komponens sűrűsége | rhoC | $61.62 - 0.147 \cdot T + 0.0001 \cdot T^2$ | kg/m ³ |
| Az C komponens viszkozitása | muC | $-1e-6 + 4e-8 \cdot T - 9e-12 \cdot T^2$ | Pas |
| Az C komponens hőkapacitása | cpC | $317.57 + 1.1228 \cdot T - 0.0008 \cdot T^2$ | J/kgK |
| Az átlagos sűrűség | rhoX | $(cA \cdot \rho_A + cB \cdot \rho_B + cC \cdot \rho_C) / (cA + cB + cC)$ | kg/m ³ |
| Az átlagos viszkozitás | muX | $(cA \cdot \mu_A + cB \cdot \mu_B + cC \cdot \mu_C) / (cA + cB + cC)$ | Pas |
| Az átlagos hőkapacitás | cpX | $(cA \cdot M_A \cdot cp_A + cB \cdot M_B \cdot cp_B + cC \cdot M_C \cdot cp_C) / (cA \cdot M_A + cB \cdot M_B + cC \cdot M_C)$ | J/kgK |
| Effektív diffúzió A komponensre | DAeff | DA/2 | |
| Effektív diffúzió B komponensre | DBeff | DB/2 | |
| Effektív diffúzió C komponensre | DCeff | DC/2 | |
| | K | $10^{(7.01 - 4800/T)}$ | |
| | k | $kp \cdot (1 - K)$ | |

Konstansok

| | | | |
|---|---------|---------|---------------------|
| Betáplálási Áram sebessége | v0 | 0.13 | m/s |
| Gáz hővezetési tényezője | lambdaG | 5 | W/(m*K) |
| Katalizátor hővezetési tényezője | lambdaS | 10 | W/(m*K) |
| Katalizátor sűrűsége | rhoS | 1800 | kg/m ³ |
| Katalizátor hőkapacitása | cpS | 800 | J/(kg*K) |
| Kezdeti hőmérséklet | T0 | 320 | K |
| Az A komponens kezdeti koncentrációja | cA0 | 750 | kmol/m ³ |
| Az B komponens kezdeti koncentrációja | cB0 | 800 | kmol/m ³ |
| Az A komponens moláris tömege | MA | 0.0281 | kg/mol |
| Az B komponens moláris tömege | MB | 0.0709 | kg/mol |
| A reakció entalpia változása | dHr | -112000 | J/mol |
| Az C komponens moláris tömege | MC | 0.0989 | kg/mol |
| A termék komponens kezdeti koncentrációja | cC0 | 0.1 | kmol/m ³ |

Anyagmérleg

D : Diffúziós állandó

∇cI : I komponens

R : komponens forrás

u : Közeg sebessége

Hőmérleg

k : hővezetési tényező

∇T : Hőmérséklet gradiens

Q :Hő forrás

ρ :Közeg sűrűsége

C_p :Közeg fajhője

u :Közeg sebessége

Impulzus mérleg

ρ :Közeg sűrűsége

u :Közeg sebessége

η :Közeg dinamikus viszkozitása

∇u : Sebesség gradiens

F : Egyéb erők, erőterek

IRODALOMJEGYZÉK

Csanády Gergely (2007): Heterokatalitikus reaktorok szimulációs vizsgálata, diplomamunka

Varga Tamás, Szeifert Ferenc, Chován Tibor, Réti József (2007) Study of runaway phenomenon by dynamic simulation in a heterocatalytic tube reactor

T. Varga, G. Rádi, T. Chován (2008) Improving the mathematical model of a heterocatalytic tube reactor, Hungarian Journal of Industrial Chemistry, Veszprém,

R. W. Lewis, P. Nithiarasu and K. N. Seetharamu, Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow, John Wiley & Sons, Ltd ISBNs: 0-470-84788-3 (HB); 0-470-84789-1 (PB), 2004

M. Kunczmann, Newton-Raphson Method in Nonlinear Magnetics, COMSOL Conference Budapest, 2008, 17-23 oldal

Levelezési cím:

Rádi György

Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

University of Pannonia, Department of Process Engineering

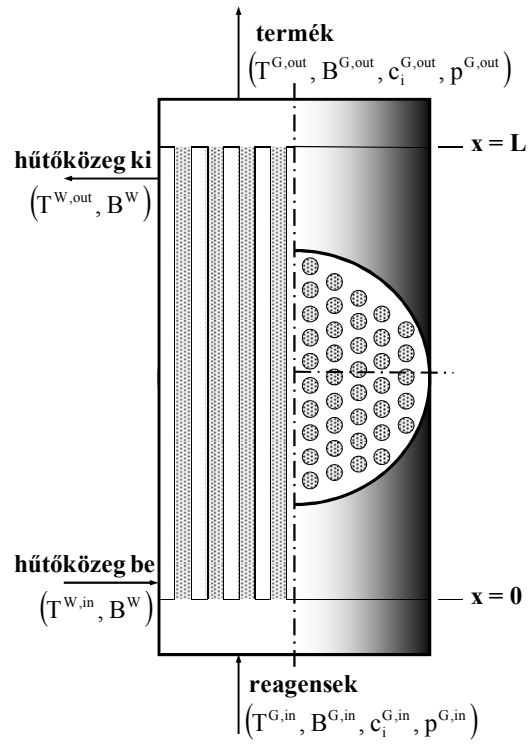
H-8200 Veszprém, Egyetem út 10.

Tel.: +36 88-624-447, Fax: +36 88-624-171

e-mail: radigy@fmt.uni-pannon.hu

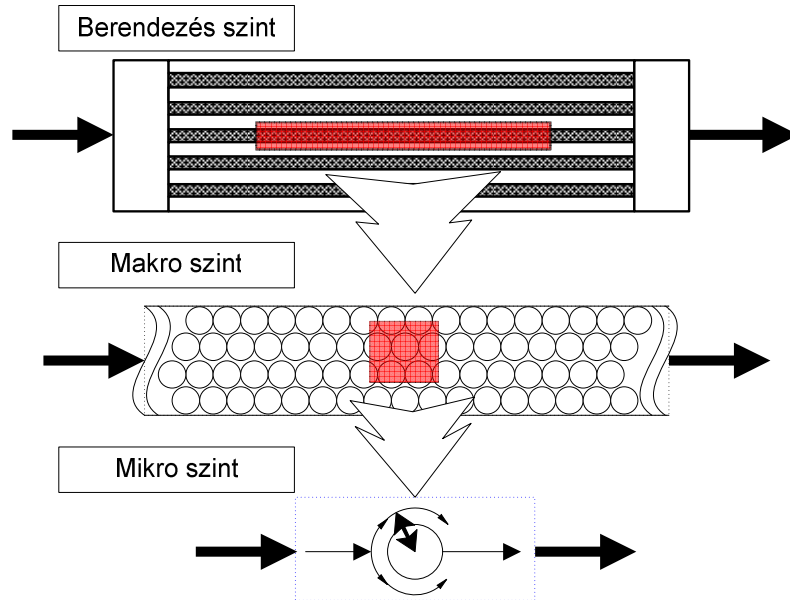
1. ábra

A reaktor vázlata



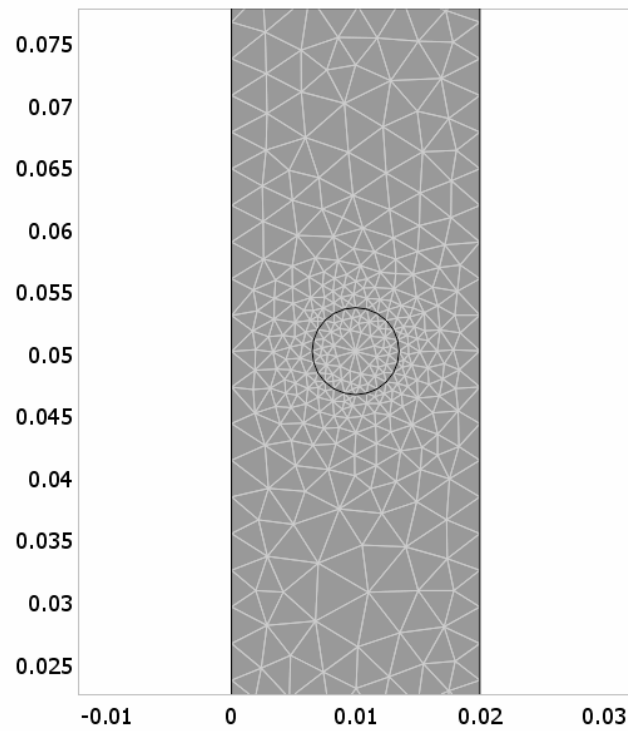
2. ábra

A reaktormodellezés hierarchiája



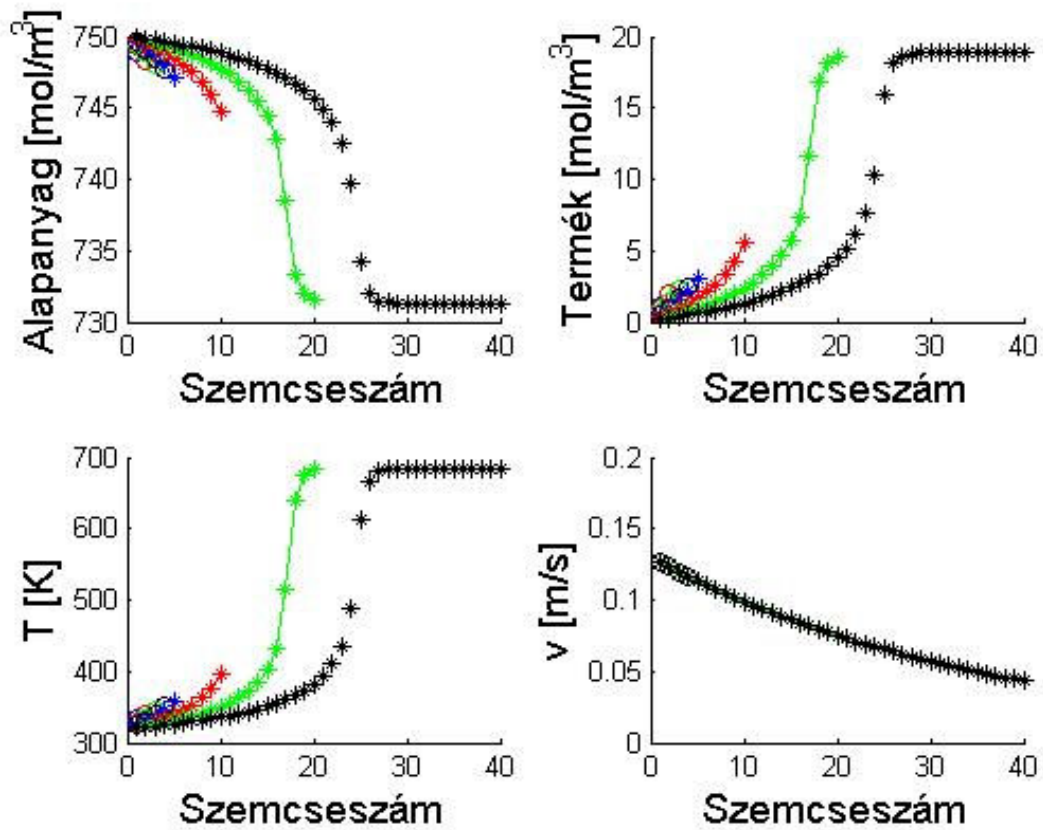
3. ábra

A katalizátor szemcse modellre generált mesh



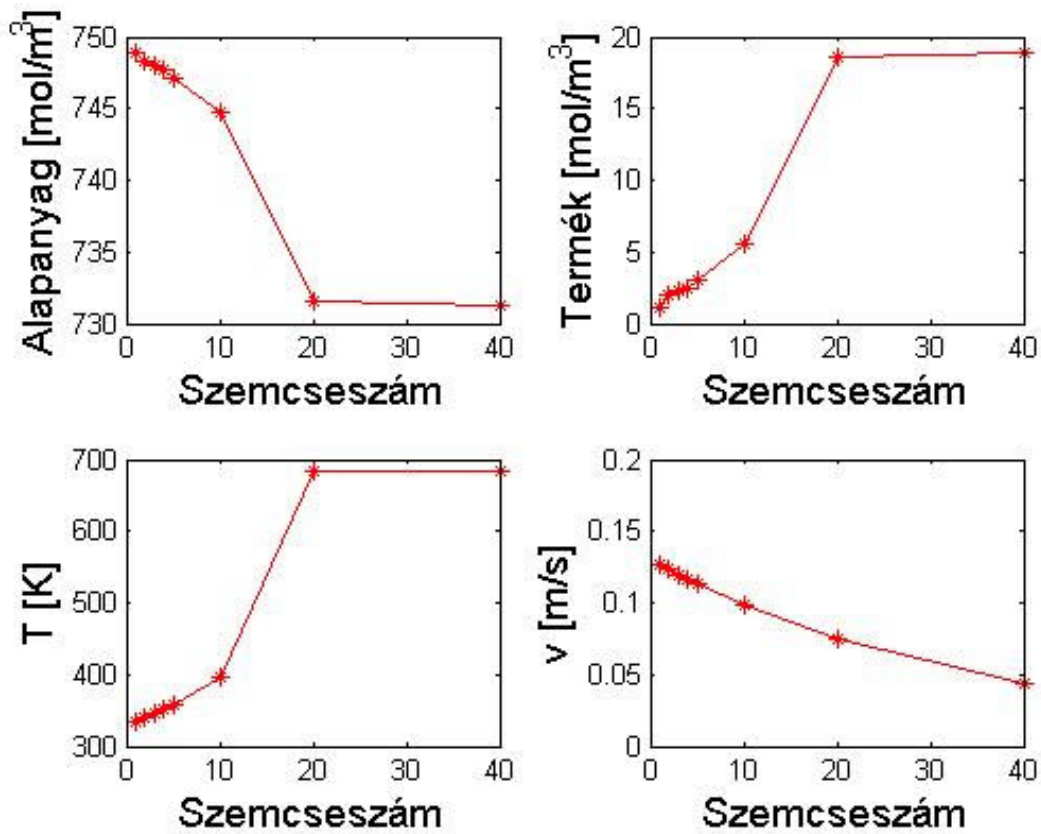
4. ábra

Állandó katalizátor térfogat mellett tulajdonság változás kimeneti értékei változó katalizátormennyiség osztás függvényében



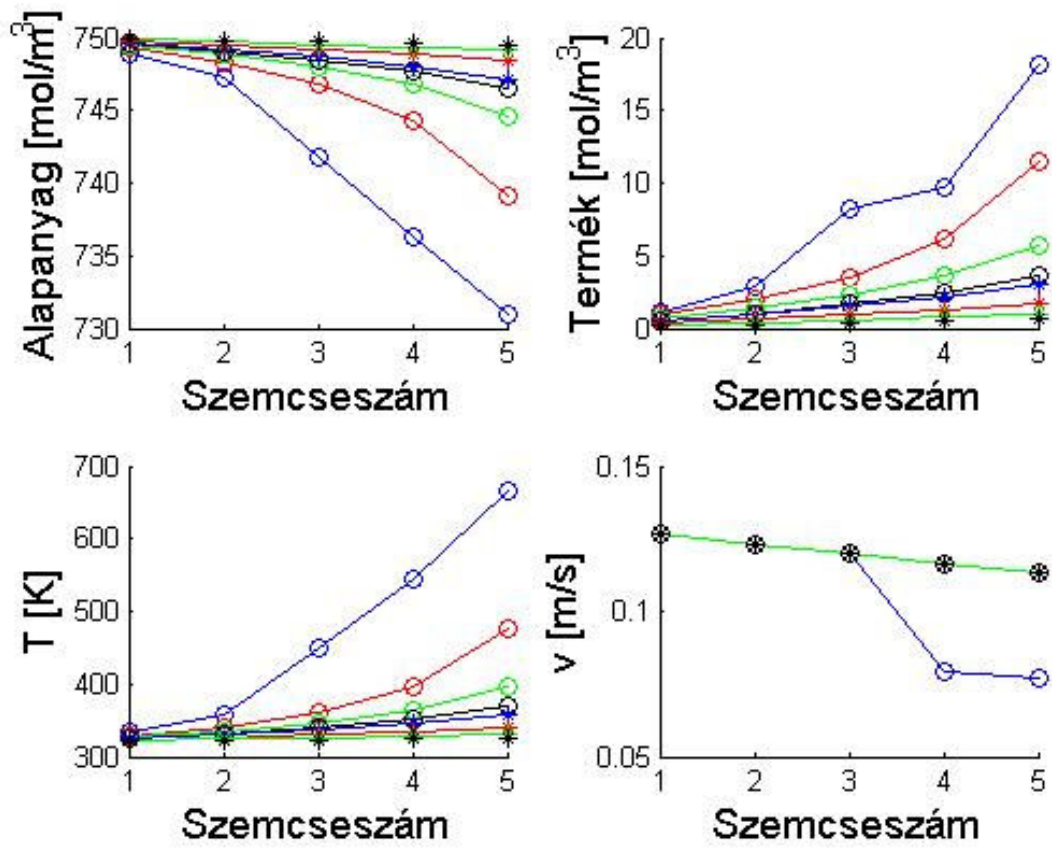
5. ábra

Állandó katalizátor térfogat mellett tulajdonság változás profiljai változó katalizátormennyiség osztás függvényében



6. ábra

Állandó szemcseszám mellett tulajdonság változás profil változó szemcseméret függvényében



7 ábra

Állandó szemcseszám mellett tulajdonság változás kimeneti értéke változó szemcseméret függvényében

