

Kevert reaktorok dinamikai viselkedésének modell alapú vizsgálata

Model based dynamic examination of stirred reactors

Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor

Pannon Egyetem,

Vegyésmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,

Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék,

8200 Veszprém

Summary

Engineering problem solving such as process design, process optimization, safety analysis, etc.; relies widely on mathematical models of the process. To solve various engineering problems different models with different complexity are needed. The primary goal of this work is to create mathematical models with different complexity, and compare them to find out, how the information can be extracted from these models and be applied to solve engineering problems. In preliminary design less complex models can be sufficient to determine the size of the unit, however at other levels more complex model can be needed, e.g. to design the start up of a reactor, or to support the control of the process.

One of the most important aspects in a chemical plant is the safety protocols assuring the safety of workers and equipment. With the help of Computational Fluid Dynamics (CFD) the engineers can check any part of the process system, and find possible sources of danger, such as thermal hot spots, and prevent safety problem. Based on the developed detailed hydrodynamic model of a system the critical parameters and operation limits can be determined. Because of the detailed examination of the processes better yields can be achieved and higher quality products can be produced.

A stirred tank reactor with a highly exothermic reaction is studied in this work, because in the modern chemical technologies mixing is one of the most important operations, and stirred reactors used widely in industrial applications. The stirring system of a mixed tank is always an important aspect of the design, because the involved processes (such as reactions, heat or component transport) usually require proper contact and homogeneity of the existing phases. For the suitable homogeneity the design and the size of the moving parts are also important problems. In certain situations attachment of static parts to a stirred tank (such as baffles) may have an important effect too.

The analyzed highly exothermic reaction is the oxidation of sodium thiosulphate with hydrogen peroxide. The reaction kinetic parameters of the analyzed reaction were determined in an earlier case-study. For developing models of the investigated system with increasing complexity the hierarchical modeling concept is followed. Three different types of models have been developed: perfectly mixed reactor model; compartment model; and CFD models in different coordinate systems. Since the reaction is highly exothermic the thermal runaway problem must have been investigated thoroughly.

Perfectly mixed reactor model is only capable to describe the reaction in a reactor with hypothetically perfect mixing. This can also be used to determine the minimal reaction time. This is the most simple model have been discussed in this paper. Perfectly mixed reactor model is a concentrated parameter model, and capable of solving various engineering problems.

The compartment model is more complex; this model can handle hydrodynamics at a certain level. Compartment models usually have two or more separate parts, called compartments, and can be used for more effective modelling of macro mixing.

The two dimensional CFD models can be used to examine the mixing time parameter; however these models cannot be used to examine runaway situations thoroughly, because these models display the system only in well defined slices. Hence, a proper three dimensional model can be used to find hotspots during the operation, and to keep the state-variables of the process in safe conditions. The perfectly mixed vessel models and compartment models were implemented in MATLAB/SIMULINK program package. The CFD models were implemented in COMSOL Multiphysics.

The primary goal of this study is to create models with different level of complexity and determine which model is the best suited for solving different engineering tasks such as process design, scale-up, or optimisation. etc.

Keywords: computational fluid dynamics, stirred tank, model complexity, reactor runaway

Bevezetés

A modern technológiákban a keverés az egyik legfontosabb művelet. Egy kevert reaktorban a keverőrendszer mindig kritikus lépése a tervezésnek, mivel a végbemenő folyamatok (mint például reakciók, hő vagy komponenstranszport folyamatok) megfelelő érintkezést igényelnek, valamint a jelenlévő fázisok megfelelő homogenitását [1].

Manapság egyre szélesebb körben alkalmaznak modell bázisú módszereket az ipari gyakorlat során. Megfelelően felépített modellel lehetővé válik a rendszer dinamikus viselkedésének vizsgálata, a tömeg, hő és impulzus transzport folyamatok elemzése alapján.

Ebben a dolgozatban hidrogén–peroxid és nátrium – hidroxid reakciójának kinetikai modelljét vizsgáltuk egy kevert berendezésben [2]. A különböző bonyolultságú modellek fejlesztésénél hierarchikus modellezési koncepciót követtünk [3]. Három különböző típusú modellt tanulmányoztunk: tökéletesen kevert üst modellt; cellás modellt; valamint numerikus áramlástani modelleket. Mivel a reakció erősen exoterm, ezért lényeges lehet a hőmérséklet elfutás jelenségének vizsgálata is.

Ebben a munkában többféle bonyolultságú modellt tanulmányoztunk abból a célból, hogy meghatározzuk melyik modell milyen mérnöki feladat megoldására alkalmas. A kutatás fő célja, hogy feltárja a különböző bonyolultságú modellek közötti hasonlóságokat, és különbségeket, és hogy megvizsgáljuk a modellek alkalmazhatóságát különböző bonyolultságú feladatok megoldásában.

Különböző célok eléréséhez különböző bonyolultságú modellekre lehet szükség. Kevert rendszerek dinamikus viselkedésének leírására a legegyszerűbb és ezért leginkább alkalmazott tökéletesen kevert üst modell, vagy ideális cső modell használható. A tökéletesen kevert üst modell esetében a teljes berendezés homogén, és koncentrált paraméterű modell használható. Az ideális cső modell esetében számolni kell a csőreaktorban fellépő inhomogenitásokkal, és

elosztott paraméterű modell kidolgozására van szükség [4].

On-line irányítási feladatokhoz, vagy összetett problémák megoldásához, mint például tervezési specifikációk meghatározásához bonyolultabb modellekre lehet szükség. A második modellezési szint, amiről ebben a dolgozatban szót ejtünk a cellás modellek csoportja. Ezek a modellek legalább kettő jól definiált cellát tartalmaznak, tökéletesen kevert üst, ideális cső, elosztó, illetve keverő modellt használva építőkövekként. A legfontosabb ezeknek a modelleknek az esetében az, hogy meghatározzuk a cellák közötti kapcsolatokat leíró paramétereket [5]. Például egy kevert üstre felírt cellás modell a legegyszerűbb esetben is minimum két cellát tartalmaz, egy tökéletesen kevert üst cellát, ami a keverőelem környéki régiót írja le, valamint egy másik cellát, amit cirkulációs zónának nevezhetünk [6]. Ahhoz hogy feltárjuk a kapcsolatokat e cellák között mindenképpen meg kell határoznunk a cellák térfogatát, a cirkulációs arányokat, valamint más az adott rendszerre jellemző paramétereket [7]. Az utóbbi években kutatások folynak a hibrid CFD - cellás modellek létrehozására, amelyek alkalmasak lehetnek akár 100 cella kezelésére is [8].

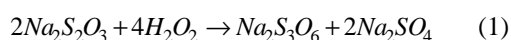
A CFD modellek a legbonyolultabb modellek, amikkel ebben a dolgozatban foglalkozunk. A CFD modellek alkalmasak lehetnek a rendszer teljes hidrodinamikájának vizsgálatára, az áramlási képek leírására, a koncentráció eloszlás, valamint a hőmérsékleti maximumok feltárására. Megfelelően validált CFD modellek felhasználásával egy teljesen új szinten tárható fel a rendszer, és a mérnökök jobban megismerhetik a berendezés viselkedését, akkor is, ha nem normál üzemeltetési paraméterek állnak fent, mint például hőmérséklet elfutás esetén [9]. Azonban minden esetben szükséges a CFD modellek validálása, ami nem egyszerű feladat, mivel több dimenzióban kell sebességet, illetve koncentrációt mérni. A validálásra lézeres módszerek, vagy keverési idő mérési módszerek használatosak leggyakrabban. Ezen modellek segítségével lehetővé válik veszélyes szituációk megelőzése. Emellett a CFD

modellek tervezési eszközökként is kitűnően megállják a helyüket [10] [11].

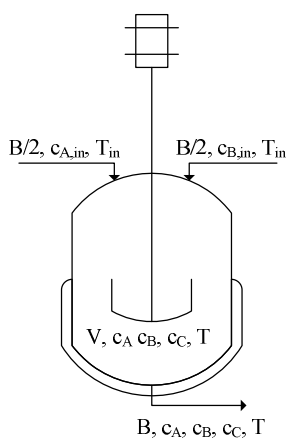
A tökéletesen kevert üst modellt és a cellás modellt MATLAB/SIMULINK programcsomag felhasználásával, míg a CFD modelleket COMSOL Multiphysics program segítségével képeztük le.

Modellezési megközelítés

Az egyes modellekben ugyanazt az exoterm hőszínezetű reakciót írtuk le, ahol a nátrium – tritronát a termék:



A vizsgált kevert berendezés folyamatos üzemeltetésű. A kidolgozott modellekben természetesen azonos modell paramétereiket alkalmaztunk a reaktor méreteinek megadásához (kivéve a keverőelem paramétereit, mivel a keverőelem csak a CFD szimulációknál jelenik meg). A reaktor sémáját az 1. ábra, míg paramétereit az 1. táblázat tartalmazza:



1. ábra A reaktor sémája

Fordulatszám	20	[1/min]
Sűrűség	1000	[kg/m ³]
Térfogat	0,375	[m ³]
Betáplálás	2e-4	[m ³ /s]
Viszkozitás (dinamikai)	1,00E-03	[Pas]
Komponens diffúzió	1,00E-05	[m ² /s]

1. táblázat A modell paramétereit

Mivel a reakció erősen exoterm, és a reakciósebesség hőmérsékletfüggése is jelentős, ezért mindenképpen szükség van a hőmérség felírására is. Minden modellben definiáltunk komponens, és hőmérséget:

Komponensmérleg

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{B}{V} \cdot (c_{i,be} - c_i) + v_i \cdot r$$

$$i = \{Na_2S_2O_3, H_2O_2, Na_2S_4O_6, Na_2SO_4, H_2O\} \quad (2)$$

Hőmérleg

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\rho c_p} \cdot r(-\Delta H) + \frac{B}{V} (T_{IN} - T) \quad (3)$$

Emellett a CFD modellek esetében szükséges volt az impulzusmérleg definiálása is.

Impulzusmérleg

$$\rho \cdot \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \cdot (u \cdot \nabla) \cdot u = \nabla \cdot [-pI + \tau] + F \quad (4)$$

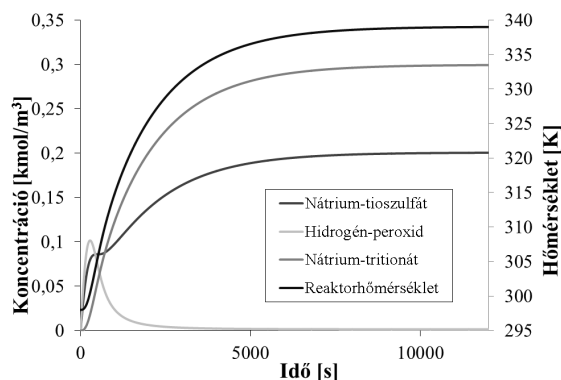
Eredmények

Tökéletesen kevert üst modell

A tökéletesen kevert üst modell esetében a matematikai leképezés a módosított Dahmköhler egyenleteken alapul. A modell MATLAB programban került leképezésre és megoldásra. Az 2. ábra a tökéletesen kevert üst modell megoldásával kapott állapotváltozó trajektóriákat mutatja.

A tökéletesen kevert üst modell az alábbi feladatokban használható fel:

- maximum produktivitás és konverzió számítása;
- optimalizálás és reaktor tervezési feladatok támogatása;
- irányítási struktúrák tanulmányozása;
- elfutási körülmények vizsgálata;
- stb.



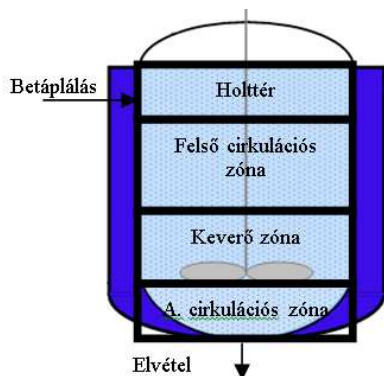
2. ábra A tökéletesen kevert üst modell megoldása

Cellás modell

A munka e szintjén négy különböző típusú elemi cellát alkalmaztunk a makro keveredési viszonyok jobb modellezése céljából. Az alkalmazott cellák:

- tökéletesen kevert üst;
- keverő;
- elosztó,;
- holttér.

Az első cella teljesen egyezik az előzőekben tárgyalt tökéletesen kevert üst modellel. A keverőnek és az elosztónak nincsen térfogata, és a cirkulációs körök modellezésére használhatóak. A holttér egy térfogattal rendelkező cellát jelöl, azonban áramlás nélkül definiáljuk. A cirkulációs arányoknak konstans értékük van, és a keverő zóna és a cirkulációs zónák közötti kapcsolatot írja le. A 3. ábra a vizsgált reaktor felosztását ábrázolja, míg a 4. ábra a cellás modell felépítését mutatja.

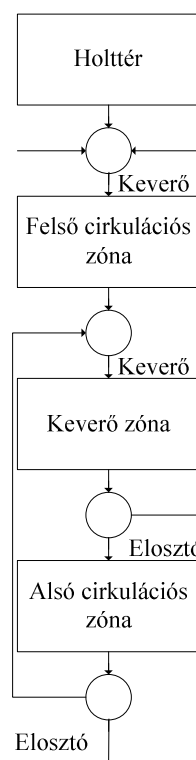


3. ábra A vizsgált reaktor cellákra bontása

Nyolc cellát alkalmaztunk ebben az esetben: egy holtteret, három tökéletesen kevert üstöt a keverő, valamint az alsó és felső cirkulációs zóna leírására, valamint két elosztót és két keverőt. A holttér térfogata a teljes térfogat 15 %-a, emellett mindhárom reaktor cella azonos térfogatú.

A cellás modell alkalmazható:

- bonyolultabb irányítási és tervezési feladatokra;
- makro keveredés és komplex reakciórendszerek leírására;
- hőtranszport folyamatok részletesebb leírására és tanulmányozására;
- stb.

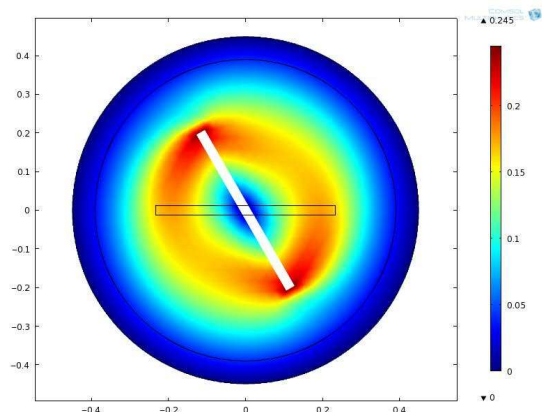


4. ábra Cellás modell struktúra a kevert reaktorra

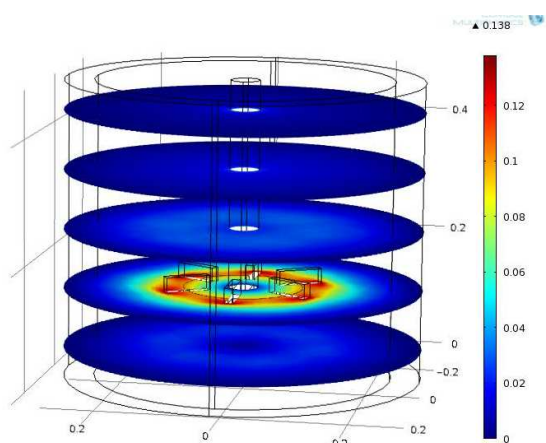
Két és háromdimenziós CFD modellek

CFD környezetben történő modellezéshez a COMSOL Multiphysics programcsomagot használtuk. A vizsgált keverőelem hatlapú Rushton turbina a háromdimenziós esetben, és egy sima lapátos keverő a kétdimenziós esetben. A fordulatszám 20 1/min volt. A kétdimenziós modell esetén nem írható le folyamatos üzemű rendszer,

mivel ebben az esetben a geometria egy metszete a valós reaktornak. Esetünkben ez a keverőelem magasságában lévő metszeti kép. A kétdimenziós CFD modell megoldását az 5. ábra, míg a háromdimenziós CFD modell megoldását az 6. ábra szemlélteti.



5. ábra A 2D CFD modell megoldása (sebességi mező)



6. ábra A 3D CFD modell megoldása (sebességi mező)

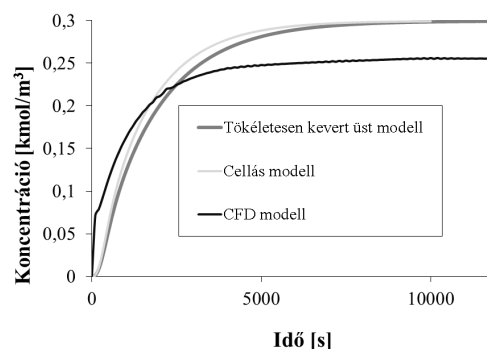
A két modell megoldása jellegében hasonló, az eltérések a keverőelemek alakjából fakadnak. Mindkét esetben látható, hogy a sebességmaximumok a keverőelemek végénél alakulnak ki, majd mind a keverőszár, mind a reaktorfal felé közeledve csillapodik a hőmérséklet. A háromdimenziós ábrán látható a sebesség z-irányú változása is. A CFD modellek alkalmazhatóak:

- elfutási reakciók a valós reaktor kialakítások mellett történő vizsgálata;

- különböző keverőgeometriák alkalmazásának hatása;
- új tartályelrendezések tesztelése, vizsgálata;
- többszintű tervezési és optimalizálási feladatok megoldása;
- méretnövelési problémák kezelése;
- stb.

Értékelés

A kutatás utolsó lépéseként összehasonlítottuk a három modellt. Az eredményeket a 7. ábra szemlélteti. A koncentráció ebben az esetben a termékkoncentrációra utal. A CFD modell megoldása eltér a többitől, mivel ebben az esetben valós geometriában vizsgáljuk a rendszert, így jelentősebbek a kialakuló inhomogenitások. A validáció hiányában azonban nem minden esetben egyszerű meghatározni, melyik modell megfelelőbb az adott problémára.



7. ábra A modellek alapján számított termékkoncentráció trajektóriák összehasonlítása

Következtetések

A kitűzött célt – különböző bonyolultságú modellek létrehozását – elértük. A leírt modellek széles körben alkalmazhatóak ipari célokra a tervezéstől az optimalizáláson keresztül, egészen az üzemeltetési problémák megoldásáig. Minden modellezési szinten leírásra kerültek lehetséges alkalmazási részterületek. A dolgozat fő célja, hogy meghatározza, hogy a hierarchikus modellezés

melyik szintje szükségeltetik egy adott mérnöki probléma megoldásához. Azonban fontos, hogy a modell eredményeket validáljuk, ezért egy mérőrendszer kialakítása lesz a kutatás következő lépése.

Melléklek

1. melléklet A reaktor geometriai méretei:

Keverőhossz	0,6	[m]
Keverőszélesség	0,1	[m]
Keverőmagasság	0,01	[m]
Belső átmérő	1	[m]
Külső átmérő	1,2	[m]
Tartálymagasság	1	[m]
Betáplálás átmérője	0,02	[m]

Jelölésjegyzék

Név	Meghatározás	Mértékegység
c_A	hidrogén - peroxid koncentráció	[kmol/m ³]
c_B	nátrium-tioszulfát koncentráció	[kmol/m ³]
c_C	nátrium-tritionát koncentráció	[kmol/m ³]
B	Térfogatáram	[m ³ /h]
k	Sebességi állandó	1/s
ρ	Sűrűség	[kg/m ³]
c_p	Fajhő	[J/mol/K]
T_{IN}	Belépési hőmérséklet	[K]
T	Reaktorhőmérséklet	[K]
u	sebességvektor	[rpm]
t	idő	[s]
τ	nyíróerő tenzor	
g	gavitációs gyorsulás	[m/s ²]
∇	nabla - differenciáloperátor	
F	erővektor	N

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.

Irodalomjegyzék

- [1] Paul E.L., 2004., *Handbook of industrial mixing science and practice*
- [2] Árva P., Havas J., 1974. *Folyamatos üstreaktor vizsgálata*,
- [3] Hango K, 2001. *Process Modelling and Analysis*
- [4] Perry R.H., 1997. *Perry's Chemical Engineer's Handbook (7th Edition)*
- [5] Vrabel P., 1999., *Compartment model approach: Mixing in Large Scale Aerated Reactors with Multiple Impellers*, Trans IChemE, 77, Part A, 310-315
- [6] Alexopoulos A.H., 2002., *CFD analysis of turbulence non homogeneity in mixing vessel: A two compartment model*, *Chemical Engineering Science*, 57, 1735-1752
- [7] Alves S.S., 1997., *Alternative compartment models of mixing in tall tanks agitated by multi-rushton turbines*, IChemE, 335-338
- [8] Delafosse A., 2010., *Stochastic modelling of a micro-organism displacements in a stirred-tank bioreactor*, Poster
- [9] Milewska A., 2007., *CFD simulation of accidents in industrial batch stirred tank reactors*, *Chemical Engineering Science*, 62, 4920-4925
- [10] COMSOL News 2010.
- [11] Wei H., 2010., *Computer-aided design and scale up of crystallization processes: Integrating approaches and case studies*, *Chemical Engineering Research and Design*, 88, 1377-1380