

VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE
Fakulta chemicko-inženýrská
Ústav chemického inženýrství

DIPLOMOVÁ PRÁCE

**VÝPOČET VZNOSU PEVNÉ ZRNITÉ FÁZE
V MECHANICKY MÍCHANÉ NÁDOBĚ METODOU CFD**

Vypracoval: Bc. TOMÁŠ ANTECKÝ

Vedoucí práce: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Studijní program: Procesní inženýrství a informatika

Studijní obor: Chemické inženýrství, bioinženýrství
a matematické modelování procesů

Rok: 2012

VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE

Ústav: Ústav chemického inženýrství

Akademický rok: 2011/2012

Zadání diplomové práce

Student(ka): **Bc. Tomáš Antecký**

Fakulta: **Fakulta chemicko-inženýrská**

Studijní program: **Procesní inženýrství a informatika**

Obor: **Chemické inženýrství, bioinženýrství a matemat. model.procesů**

Zaměření:

Název tématu:

Výpočet vznosu pevné zrnité fáze v mechanicky míchané nádobě metodou CFD

Anglický název tématu:

Prediction of solid concentration in a stirred tank using CFD method

Zásady pro vypracování:

1. Provedte literárni rešerši na dané téma.
2. Metodou CFD vypočtěte vznos pevné zrnité fáze v mechanicky míchané nádobě se zaměřením na vliv modelu součinitele odporu.
3. Výsledky získané metodou CFD porovnejte s dostupnými experimentálními daty.
4. Výsledky zpracujte do podoby závěrečné písemné zprávy.

Seznam doporučené literatury:

1. Sborníky evropských konferencí o míchání.
2. FLUENT 12 Users manual.
3. Bojko M., 3D proudění - ANSYS Fluent, VŠB-TU Ostrava, 2010.
4. Paul E.L., Atiemo-Obeng V.A., Kresta S.M., Handbook of industrial mixing, John Wiley and Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2004.

Vedoucí diplomové práce: **Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda**

Datum zadání diplomové práce: **15.11.2011**

Termín odevzdání diplomové práce: **11.05.2012**

Igor Schreiber
prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.
vedoucí ústavu



Stanislav Labík
prof. Ing. Stanislav Labík, CSc.
děkan

V Praze dne 15.11.2011

Souhrn

Diplomová práce se zabývá simulací procesu suspendace v mechanicky míchané nádobě pomocí metody počítačové dynamiky tekutin. Hlavním cílem bylo stanovit výšku suspenzního mraku a posoudit vliv modelu pro koeficient odporu na distribuci pevné fáze. Zkoumaný systém se skládal z válcové nádoby s plochým dnem o vnitřním průměru $T = 0,29$ m. Pevnou fázi tvořily kuličky z PVC o koncentraci 5, 10 a 15 obj. % a jako kapalná vsádka byla použita voda a polyvinylpyrrolidon. Výška plnění byla zvolena $H = T$ a k promíchání bylo použito šestilopatkové míchadlo se šikmo skloněnými lopatkami (úhel zkosení 45°). K vlastní simulaci byl využit komerční software ANSYS FLUENT 12.1.4, do kterého bylo implementováno několik modelů pro koeficient odporu v podobě uživatelem definovaných funkcí. Pro popis vícefázového proudění byly použity přístupy Eulerian-Eulerian a Eulerian-Granular spolu se standardním $k-\epsilon$ turbulentním modelem. Výsledky získané numerickou simulací dobře korespondovaly s experimentálním měřením. Zvláště dobré shody bylo dosaženo především v případech, kdy objemový zlomek pevné fáze činil 5 % a 10 %.

Summary

The thesis is dealing with the simulation of suspension in a mechanically stirred tank using computational fluid dynamics. The main goal was to determine the height of suspension cloud and asses the impact of the model for the drag coefficient on the distribution of solid phase. The studied system consisted of a flat bottom cylindrical tank with an inner diameter $T = 0.29$ m. The solid phase was formed of PVC particles and their concentration was 5, 10 and 15 vol. %. Tap water and polyvinylpyrrolidone were used as working liquid. The height of filling was chosen to $H = T$ and agitation was provided by a pitched six-blade turbine (the pitch angle 45°). The simulations were done by the commercial software ANSYS FLUENT 12.1.4, which contained several drag coefficient models implemented in the form of user-defined functions. Eulerian-Eulerian and Eulerian-Granular approaches together with standard $k-\epsilon$ turbulence modele were used for a description of the multiphase flow. The obtained results corresponded well with the experimental measurements. Especially good agreement was found for the simulations when the volume fraction of the solid phase was equal to 5 % or 10 %.

Tato diplomová práce byla vypracována na Ústavu chemického inženýrství Vysoké školy chemicko-technologické v Praze v období leden 2012 – květen 2012.

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně. Veškeré literární prameny a informace, které jsem v práci využil, jsou uvedeny v seznamu použité literatury.

Byl jsem seznámen s tím, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), zejména se skutečností, že Vysoká škola chemicko-technologická v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona, a s tím, že pokud dojde k užití této práce mnou nebo bude poskytnuta licence o užití jinému subjektu, je Vysoká škola chemicko-technologická v Praze oprávněna ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které na vytvoření díla vynaložila, a to podle okolností až do jejich skutečné výše.

Souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách, ve znění pozdějších předpisů.

V Praze dne

Poděkování

Velice rád bych poděkoval mému vedoucímu Doc. Dr. Ing. Milanu Jahodovi za cenné rady a připomínky, které přispěly ke zlepšení této diplomové práce.

Dále bych chtěl poděkovat Ing. Zbyňku Kálalovi za významnou pomoc při přípravě CFD simulací.

Obsah

1	Úvod	1
2	Teoretická část	2
2.1	Suspendace	2
2.1.1	Stupně suspendace	2
2.1.2	Kritická frekvence otáčení míchadla	3
2.1.3	Kvalita suspenze (stupeň homogenizace)	4
2.1.4	Výška vznosu pevné fáze	5
2.1.5	Doba homogenizace	5
2.2	Počítačová dynamika tekutin (CFD)	6
2.2.1	Úvod do CFD	6
2.2.2	Rovnice kontinuity	8
2.2.3	Bilance hybnosti v kontinuu	8
2.2.4	Vícefázové modely	10
2.2.5	Koeficient odporu	14
2.2.6	Turbulentní modely	15
2.2.7	Modelování rotujícího míchadla	19
2.2.8	Transport složky bez chemické reakce	20
3	Literární rešerše	21
3.1	Suspendace pevné fáze v míchaných nádobách	21
4	Experimentální část	28
4.1	Popis experimentu	28
5	Výpočetní část	31
5.1	Tvorba geometrie a výpočetní sítě	31
5.2	Uživatelem definované funkce	33
5.3	Vlastní CFD simulace	33
6	Výsledky a diskuze	36
6.1	Rychlostní pole v nádobě	36
6.2	Srovnání modelů pro koeficient odporu	38
6.3	Výška vznosu pevné fáze	42
6.3.1	Srovnání modelů Eulerian-Eulerian a Eulerian-Granular	44
6.4	Doba homogenizace	47
7	Závěr	52
	Seznam symbolů	53
	Literatura	57
	Příloha	60

1 Úvod

Proces míchaní patří k nejběžnějším jevům vyskytujícím se v průmyslové praxi. Druhým nejčastějším typem míchací operace je promíchávání kapalné a pevné fáze, jenž zahrnuje např. suspendaci, dispergaci pevných částic, rozpouštění, krystalizaci nebo suspenzní polymeraci. Provozní podmínky u těchto procesů obecně záleží na požadovaném stavu, kterého má být dosaženo. Pro jejich určení je třeba zohlednit všechny fyzikální a chemické jevy nutné k dosažení žádaného provozního výsledku.

Podstatou suspendace je udržení pevné fáze ve vznosu tak, aby se zabránilo jejímu usazování a zlepšíl se mezifázový prostup hmoty či tepla. Pokud je zvolená úroveň suspendace nedostatečná (např. v důsledku nízké frekvenci otáčení míchadla), tak kvalita výsledných produktů může být ohrožena. Naopak příliš vysoký stupeň homogenizace směsi nemusí mít praktický přínos a tudíž představuje pouze zbytečné navýšení provozních výdajů. Hlavním cílem při návrhu míchacích aparátů je tedy dosažení dostatečného stavu suspendace při minimálních nákladech.

Ke stanovení provozních parametrů míchacích aparátů se často využívají empirické vzorce vytvořené na základně experimentů. Problém však může nastat, pokud jsou provozní požadavky příliš atypické a neexistují k nim vhodná experimentální data. Jedním z dalších možných přístupů, jak modelovat děje probíhající v promíchávaném systému, je využití metody počítačové dynamiky tekutin (CFD). Ve svých počátcích byla technika CFD využívána v leteckém průmyslu pro simulaci proudění vzduchu podél náběžné hrany křídla. S prudkým rozvojem výpočetní techniky postupně docházelo k tvorbě komplexnějších modelů a algoritmů, které jsou schopny se blíže přiblížit reálnému chování zkoumané soustavy, avšak za cenu rostoucích hardwarových nároků. V současnosti se technika CFD využívá ve všech oborech zabývajících se prouděním tekutin, kde experimentální měření by bylo příliš nákladné nebo obtížně realizovatelné.

Hlavním cílem předkládané práce bylo právě využití metody počítačové dynamiky tekutin pro určení distribuce pevné fáze v mechanice míchané nádobě spolu se stanovením výšky suspenzního mraku. Dále byly zkoumány rozdíly mezi jednotlivými simulacemi při použití odlišných modelů pro výpočet koeficientu odporu. Získané výsledky byly porovnány s dostupnými experimentálními daty, jenž naměřila Pavlíková (2011).

2 Teoretická část

2.1 Suspendace

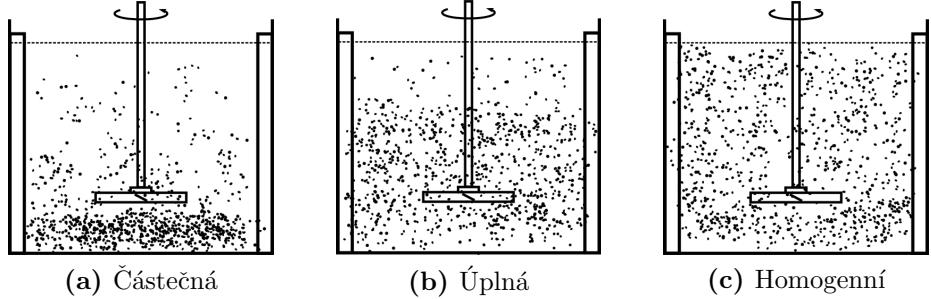
Smyslem suspendace v mechanicky míchaných nádobách je udržení pevných částic ve vznosu tak, aby došlo ke zintenzivnění transportu hmoty a tepla mezi kapalnou a pevnou fází. Pro dosažení tohoto stavu je třeba systému dodat energii v podobě mechanické práce. K vykonání této práce se používají rozmanité typy mechanických míchadel, které jsou voleny podle konkretního charakteru dané úlohy. Dodaná energie poté vede k vytvoření turbulentního proudění, jenž uvede částice pevné fáze do vznosu a následně je rozptýlí v kapalině. Nutnou podmínkou pro zajištění tohoto vznosu je, aby výsledná vertikální složka síly působící na částici, byla větší než těhová síla zmenšená o sílu vztlakovou. Menší částice, jejichž hustota je přibližně rovna hustotě kapaliny, se po dosažení suspenzních podmínek pohybují společně s kapalinou. Při nižších koncentracích pevné fáze se toto proudění chová spíše jako jednofázový tok. Naopak rychlosť pohybu těžších částic se liší od rychlosti kapalné fáze, jenž musí na pevnou fázi působit větší silou k zabránění jejímu usazování. Výslednou kvalitu vzniklé suspenze ovlivňuje řada faktorů, kde mezi nejvýznamnější patří fyzikální vlastnosti jak kapalné, tak pevné fáze, provozní podmínky a geometrie systému a míchadla.

2.1.1 Stupně suspendace

Nároky na homogenitu vsádky se liší dle konkrétních provozních požadavků. Jedním z pojmu, který se používá k popisu míry homogenizace vsádky v mechanicky míchaných nádobách, je stupeň suspendace. Obecně se rozlišují tři stupně suspendace: částečná, úplná a homogenní (obrázek 2.1).

Při částečné suspendaci lze vizuálně pozorovat pohyb částic pevné fáze pouze v blízkosti dna nádoby. Toto shlukování má za následek zhoršení přestupu tepla a hmoty, což v důsledku může snížit rychlosť probíhajících chemických reakcí. Z výše uvedeného vyplývá, že podmínky částečné suspendace jsou postačují pouze při míchaní vysoce rozpustných látek.

Stav úplné suspendace je charakterizován pohybem pevné fáze v celé nádobě, přičemž žádná částice nezůstává na dně déle než jednu až dvě sekundy. Tato podmínka



Obrázek 2.1: Stupně suspendace

se někdy označuje jako Zwieteringovo kritérium. Zwietering (1957) jako první na základě experimentů navrhl vztah k výpočtu kritické (minimální) frekvence otáčení míchadla potřebné pro dosažení stavu úplné suspendace. Při tomto stavu je maximální povrch částic vystaven kapalině, což má za následek intenzivní transport hmoty a tepla mezi jednotlivými fázemi.

Posledním stádiem je dosažení stavu homogenní suspendace, při němž částice pevné fáze dosahují prakticky rovnoměrného rozložení v celém promíchávaném systému. Jakkoliv další zvýšení frekvence otáčení míchadla nebo jeho příkonu, již nemá prakticky žádný vliv na distribuci pevné fáze. Dosažení stavu homogenní suspendace je často důležité u procesů, které vyžadují rovnoměrné rozložení částic v systému. Příkladem takového procesu může být krystalizace, kde nerovnoměrná koncentrace pevné fáze způsobuje tvorbu míst s lokálním přesycením, jenž následně negativně ovlivňuje kvalitu vzniklých krystalů. Nicméně ve většině případů je postačující dosažení stavu úplné suspendace, který vyžaduje menší množství vykonané práce.

2.1.2 Kritická frekvence otáčení míchadla

Jak již bylo zmíněno v předcházející kapitole, kritická frekvence otáčení je minimální rychlosť otáčení míchadla potřebná k udržení částic pevné fáze ve vznosu. První, kdo navrhl empirickou korelací k jejímu výpočtu, byl Zwietering (1957). Jím navržený vztah má tvar:

$$N_{js} = \left[\frac{g(\rho_s - \rho_l)}{\rho_l} \right]^{0,45} W^{0,13} d_p^{0,2} D^{-0,85} \nu^{0,1} S \quad (2.1)$$

kde g je gravitační zrychlení, ρ_s hustota pevné fáze, ρ_l hustota kapalné fáze, W relativní hmotnostní zlomek pevné fáze, d_p průměr částice pevné fáze, ν kinematická viskozita a S je bezrozměrná Zwieteringova konstanta, která zohledňuje geometrii systému a

míchadla (tabulka 2.1). Ze vztahu je dobře patrné, že rozdíl hustot jednotlivých fází nejvýznamněji ovlivňuje výslednou kritickou frekvenci otáčení míchadla. Později provedené studie (Nienow, 1968; Baldi *a kol.*, 1978; Choudhury, 1997) obecně potvrdily platnost Zwieteringova vztahu. Nicméně Choudhury (1997) experimentálně ukázal, že při koncentraci pevné fáze menší než 2 obj. % nebo větší než 15 obj. % se již tato korelace jeví jako nepříliš spolehlivá.

Tabulka 2.1: Zwieteringovy konstanty pro 45° PBT

Šířka lopatky	Světlá výška	Hodnota
$D/3,5$		
	$T/4$	4,8
	$T/6$	4,6
	$T/8$	3,2
$D/4$		
	$T/4$	4,4
	$T/6$	4,1
	$T/8$	3,7

2.1.3 Kvalita suspenze (stupeň homogenizace)

Další užitečnou charakteristikou systému kapalina-pevná fáze je takzvaná kvalita suspenze, což je směrodatná odchylka koncentrace pevné fáze. Často se však dává přednost vyjádření pomocí objemového zlomku pevné fáze. Pro konečný počet n měření lze kvalitu suspenze definovat jako:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{c_i}{\bar{c}} - 1 \right)^2} \quad (2.2)$$

Díky své diskrétní povaze je tato veličina navíc dobře stanovitelná pomocí simulační techniky CFD. S rostoucí homogenitou systémů číselná hodnota kvality suspenze klesá a v limitním případě je nulová. Někdy se proto místo kvality suspenze používá pojem stupeň homogenizace, jenž vznikne odečtením kvality suspenze od jedničky.

Bohnet a Niesmak (1980) určili na základě experimentů hodnotu kvalitu suspenze pro jednotlivé stupně suspendace. Jejich výsledky jsou shrnutý v tabulce 2.2.

Tabulka 2.2: Rozdělení stupňů suspendace dle kvality suspenze

Stupeň suspendace	Kvalita suspenze
Částečná	$\sigma \geq 0,8$
Úplná	$0,2 < \sigma < 0,8$
Homogenní	$\sigma \leq 0,2$

2.1.4 Výška vznosu pevné fáze

Při míchaní suspenzní se ve vsádce tvoří snadno rozlišitelná oblast, ve které se vyskytuje naprostá většina částic pevné fáze. Vzdálenost mezi dnem nádoby a rozhraním této oblasti se někdy také nazývá jako výška suspenzního mraku.

Experimentálně studovali výšku suspenzního mraku např. autoři Hicks *a kol.* (1997). Z jejich měření vyplynulo, že nejvýznamnější vliv na výšku vznosu pevné fáze má poměr průměrů míchadla a nádoby (D/T), poměr světlé výšky a průměru nádoby (C/T) a koncentrace pevné fáze. Dosažení dobré distribuce částic ve vysoké nádobě ($H > T$) se ukázalo jako poměrně problematické, a proto výzkumníci zdůraznili potřebu použití více míchadel v takovýchto systémech.

Bittorf a Kresta (2002) odvodili korelace pro výpočet výšky suspenzního mraku na základě dostupných experimentálních dat, které naměřili Hicks *a kol.* (1997) a Bujalski *a kol.* (1999). Zmíněný vztah byl navržen pro rychloběžná axiální míchadla a má tvar:

$$C_H = \frac{N}{N_{js}} \left[0,84 - 1,05 \frac{C}{T} + 0,7 \frac{(D/T)^2}{1 - (D/T)^2} \right] T \quad (2.3)$$

2.1.5 Doba homogenizace

Doba homogenizace (t_{mix}) je definována jako čas potřebný k tomu, aby se hodnota normalizované koncentrace stopovací látky c^* pohybovala v předem zvoleném rozmezí. Nejčastěji se volí přípustná hodnota fluktuace $\pm 5\%$, tedy $c^* \in \langle 0,95; 1,05 \rangle$.

Výše zmíněná normalizovaná koncentrace je dána vztahem:

$$c^* = \frac{c(t) - c_0}{c_\infty - c_0} \quad (2.4)$$

přičemž $c(t)$ je koncentrace stopovací látky v čase t , c_∞ je koncentrace ve vsádce po dokonalém rozmíchání a c_0 představuje počáteční koncentraci v systému.

Hodnota doby homogenizace také velmi záleží na místě měření zmíněné koncentrace. Například Bujalski *a kol.* (1999) měřili dobu homogenizace pro systém kapalina-pevná

fáze v mechanicky míchané nádobě. Z výsledků vyplynulo, že nad suspenzním mramarem je doba homogenizace přibližně dvacetkrát delší než v oblasti, která je bohatá na přítomnost částic pevné fáze.

2.2 Počítačová dynamika tekutin (CFD)

Následující kapitola obsahuje stručný přehled základních rovnic a matematických modelů, které jsou uplatněny při simulaci pomocí techniky CFD. Hlavní důraz je kladen na problematiku izotermního vícefázového proudění kapaliny-pevné fáze v mechanicky míchaných nádobách.

2.2.1 Úvod do CFD

Počítačová dynamika tekutin (angl. computational fluid dynamics – CFD) je jedno z odvětví hydromechaniky, jenž využívá numerické metody a algoritmy k řešení problémů zahrnující proudění tekutin, transport hmoty a tepla, chemické reakce a celou řadu dalších fyzikálně-chemických jevů. Na počátku každé CFD simulace je třeba nejprve vytvořit model zkoumaného systémů na který jsou následně aplikovány matematické postupy tak, aby ze zadaných okrajových a počátečních podmínek byly získány vybrané údaje o dějích probíhajících v celé zkoumané doméně při respektování fyzikálních zákonů. Tyto zákony jsou nejčastěji formulovány v podobě parciálních diferenciálních rovnic.

S prudkým nárůstem výkonu výpočetní techniky se metoda CFD stala přístupnější širšímu množství uživatelů. Mezi její hlavní výhody patří schopnost studovat systém za podmínek, kdy experimentální měření jsou těžko proveditelná, či přímo nemožná. Díky tomu je možné např. dosáhnout znatelného snížení finančních a časových nákladů ve vývojové fází nového výrobku. Nicméně je třeba dodat, že každý simulační výpočet je silně závislý na dodaných počátečních a okrajových podmínkách, a proto technika CFD nikdy nemůže úplně nahradit experimentální měření.

Celou CFD simulaci lze rozdělit do třech hlavních kroků: tvorba geometrie a výpočetní sítě, vlastní výpočet a analýza výsledků.

Tvorba geometrie a výpočetní sítě (preprocessing) V první fází je vytvořena geometrie zkoumaného systému, která je následně rozdělena na konečný počet kont-

rolních objemů (buněk). Vzniklá výpočetní síť může obsahovat buňky různých typů. Dvojrozměrná doména se nejčastěji skládá z trojúhelníků nebo obdélníků. V trojrozměrném případě se nejčastěji využívají jehlany, hranoly, kvádry či další mnohostěny. Navíc v současnosti se již dává přednost nestrukturovaným sítím před strukturovanými. Pro strukturovanou síť platí, že každá stěna buňky přiléhá pouze k jedné stěně sousedního kontrolního objemu. Jejich hlavní nevýhodou je obtížná tvorba složitějších tvarů a nemožnost libovolného zahušťování.

Vlastní výpočet K provedení vlastního simulačního výpočtu dnes existuje celá řada jak komerčních, tak bezplatných CFD řešičů. Příkladem komerčních produktů může být např. ANSYS FLUENT, ANSYS CFX, ANSYS Polyflow nebo STAR-CCM+. Mezi nejznámější bezplatné CFD řešiče patří OpenFOAM či Code Saturne. Interně tyto softwary využívají jednu z následujících numerických metod k řešení parciálních diferenciálních rovnic:

- **Metoda konečných diferencí (FDM)**

Tato metoda, někdy též označována jako metoda sítí, patří mezi nejstarší techniky k řešení parciálních diferenciálních rovnic. Její podstatou je náhrada derivací pomocí diferenčních náhrad, což má za následek diskretizaci daného problému na konečný počet uzlů. Ve výsledku se tedy řeší soustava lineárních algebraických rovnic. Mezi jednu z hlavních nevýhod této metody je její obtížná formulace pro nestrukturované sítě.

- **Metoda konečných objemů (FVM)**

Hlavním znakem metody konečných objemů je fakt, že řeší modelové rovnice v integrální formě pro konečný počet kontrolních objemů. Díky tomu je zaručeno splnění zákonů zachování dané veličiny pro každou výpočetní buňku. Následná diskretizace výše zmíněných integrálních rovnic opět vede na řešení řídké soustavy lineárních algebraických rovnic. Drtivá většina dnešních CFD řešičů využívá právě tuto numerickou metodu.

- **Metoda konečných prvků (FEM)**

Podstatou metody konečných prvků je hledání řešení daných parciálních diferenciálních rovnic v podobě po částech definovaných funkcí na předem zvoleném počtu buněk. Ve výsledku se tedy hledají váhové koeficienty pro tyto bázové funkce tak, aby získané řešení minimalizovalo chybu approximace. Me-

toda konečných prvků je zvláště využívána v oblasti pevnostní analýzy nebo při simulaci proudění vysoce nenewtonovských tekutin.

Analýza výsledků (postprocessing) Posledním krokem každé CFD je zpracování a analýza získaných simulačních výsledků. K tomuto účelu byla vytvořena řada softwarových nástrojů, mezi které patří např. ANSYS CFD-Post, Tecplot 360 nebo ParaView. Hlavní úlohy těchto programů činí:

- výpočet dodatečných veličin
- tvorba řezů doménou
- zobrazení vektorových polí
- tvorba konturových grafů
- vyobrazení ploch o konstantní hodnotě veličiny
- paralelní porovnání několika simulací

2.2.2 Rovnice kontinuity

Základní vztahem pro popis tekutiny je rovnice kontinuity, jenž vyjadřuje zákon zachování hmoty. Pro jednofázový systém obsahující stlačitelnou tekutinu má tato rovnice tvar:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.5)$$

přičemž ρ značí hustotu tekutiny, t čas a \vec{v} je vektor rychlosti. První člen v rov. (2.5) reprezentuje změnu hustoty v čase (akumulaci) a druhý člen představuje změnu hmotnosti objemového elementu v důsledku konvekce. Pokud lze tekutinu považovat za nestlačitelnou, tak hustota kontinua je konstantní a výše zmíněný vztah se zjednoduší na rov. (2.6).

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.6)$$

2.2.3 Bilance hybnosti v kontinuu

Zákon zachování hybnosti v kontinuu je možné vyjádřit pomocí Cauchyho rovnice dynamické rovnováhy, která má tvar:

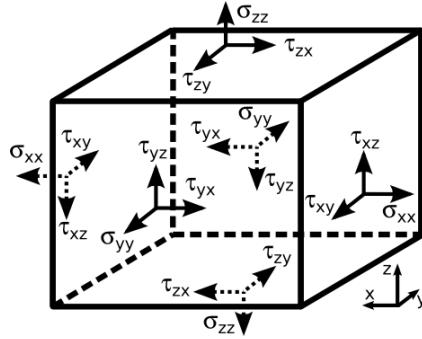
$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\nabla \vec{v}) \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} + \vec{f} \quad (2.7)$$

Symbol p značí tlak působící na objemový element, $\vec{\tau}$ je tenzor viskózního napětí a člen \vec{f} zahrnuje další objemové síly působící na kontinuum (např. gravitační sílu).

V trojrozměrné soustavě kartézských souřadnicích má tenzor viskózního napětí celkem devět složek a je definován vztahem:

$$\vec{\tau} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Složky napětí σ_{xx} , σ_{yy} a σ_{zz} působí v normálovém směru na daný objemový element a zbylé členy představují tečná napětí. Tuto skutečnost dobře ilustruje obrázek 2.2.



Obrázek 2.2: Složky viskózního napětí

Navíc pokud je daná tekutina isotropní (neupřednostňuje žádný směr deformace), tak tenzor ve vztahu (2.8) má pouze šest nezávislých složek, protože mezi tečnými napětími platí vztahy:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx}, \quad \tau_{xz} = \tau_{zx}, \quad \tau_{zy} = \tau_{yz} \quad (2.9)$$

Pro newtonovskou tekutinu dále platí, že jednotlivá viskózní napětí jsou úměrná mře lineárních deformací objemového elementu kontinua. Tenzor (2.8) lze poté vyjádřit jako:

$$\vec{\tau} = \begin{bmatrix} 2\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} + \left(\kappa - \frac{2}{3}\eta\right) \nabla \cdot \vec{v} & \eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) & \eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \\ \eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) & 2\eta \frac{\partial v_y}{\partial y} + \left(\kappa - \frac{2}{3}\eta\right) \nabla \cdot \vec{v} & \eta \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) \\ \eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) & \eta \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) & 2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} + \left(\kappa - \frac{2}{3}\eta\right) \nabla \cdot \vec{v} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Člen η představuje dynamickou (tečnou) viskozitu a κ značí dilatační (objemovou) viskozitu, jejíž hodnota je nulová pro jednoatomové plyny při nízké hustotě. Někdy se tenzor (2.10) zapisuje v úspornější podobě:

$$\vec{\tau} = \eta \left[\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right] + \left(\kappa - \frac{2}{3}\eta \right) \nabla \cdot \vec{v} \vec{I} \quad (2.11)$$

kde \vec{I} je jednotkový tenzor.

Dosazením vztahu (2.11) do rovnice (2.7) a při předpokladu nestlačitelnosti kontinua ($\nabla \cdot \vec{v} = 0$) se získá Navierova-Stokesova rovnice:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\nabla \vec{v}) \right] = -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} + \vec{f} \quad (2.12)$$

Ve trojrozměrné soustavě kartézských souřadnic lze vektorovou rov. (2.12) rozepsat na

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + f_x \\ \rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + f_y \\ \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + f_z \end{aligned} \quad (2.13)$$

Soustava rovnic (2.13) spolu s rovnicí (2.6) tvoří systém čtyř parciálních diferenciálních rovnic pro neznámé p , v_x , v_y a v_z .

2.2.4 Vícefázové modely

Velké množství přírodních a průmyslových procesů je tvořeno vícefázovým prouděním. Problematika simulace tohoto děje je daleko komplexnější než v případě systému složeného pouze z jedné fáze. V hydrodynamice je pojem fáze chápán v širším smyslu než z termodynamického hlediska. Z tohoto pohledu lze fázi definovat jako třídu materiálu, jenž interaguje určitým způsobem s dalšími částmi systému.

V současnosti existuje řada matematických modelů, které popisují vícefázové proudění a lišící se výsledným způsobem použití. Následující podkapitola obsahuje přehled modelů, které se nejčastěji využívají k simulaci suspendace v mechanicky míchaných nádobách. Především se jedná o simulační techniky Eulerian-Lagrangian, Eulerian-Eulerian a Eulerian-Granular.

Model Eulerian-Lagrangian

Tento typ modelu uvažuje primární tekutou fázi jako kontinuum s dispergovanou sekundární fází. Pro primární fázi je řešena rovnice kontinuity (2.6) spolu s Navierovými-Stokesovými rovnicemi (2.13), zatímco pro dispergovanou fázi je řešena trajektorie každé částice nebo skupiny částic separátně. Jednotlivé fáze si mohou mezi sebou vyměňovat hmotu, hybnost a energii, avšak vzájemné interakce částic mezi sebou jsou většinou zanedbány. Model Eulerian-Lagrangian je především vhodný pro systémy, kde objemový zlomek dispergované fáze nepřesáhne 10 % (např: rozprašovací sušárny, cyklóny nebo spalování uhlí či kapalného paliva).

Řešením bilance sil působící na částici (2.14) je získána její trajektorie v daném časovém okamžiku.

$$m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = \vec{F}_p + \vec{F}_g + \vec{F}_B + \vec{F}_D + \vec{F}_{ad} \quad (2.14)$$

Členy m_p a \vec{v}_p na levé straně rov. (2.14) představují hmotnost částice a její vektor rychlosti. Pravá strana výše zmíněné rovnice obsahuje součet jednotlivých sil působících na diskrétní fázi. Symbol \vec{F}_p značí sílu tlakového gradientu, jenž působí na částici vlivem akcelerace okolní kapaliny. Další členy \vec{F}_g a \vec{F}_B reprezentují gravitační resp. vztlakovou sílu. Jednotlivé příspěvky těchto sil lze rozepsat do tvaru:

$$\vec{F}_p + \vec{F}_g + \vec{F}_B = V_p \nabla p + m_p \vec{g} - V_p \rho_f \vec{g} \quad (2.15)$$

Odporová síla \vec{F}_D představuje výslednici sil, kterou tekutina působí proti pohybu částic. Pro kulovou částici lze tento člen vyjádřit jako:

$$\vec{F}_D = \frac{\pi}{8} C_D \rho_f d_p^2 |\vec{v}_p - \vec{v}_f| (\vec{v}_p - \vec{v}_f) \quad (2.16)$$

Bezrozměrné číslo C_D v rov. (2.16) se nazývá koeficient odporu nebo součinitel tření a vyjadřuje závislost odporu prostředí na tvaru tělesa, charakteru proudění a vlastnostech tekutiny. Detailnějším rozborem tohoto členu se zabývá podkapitola 2.2.5.

Poslední člen \vec{F}_{ad} v bilance (2.14) zahrnuje další síly působící na částici pevné fáze. Jedná se například o Saffmanovu vztlakovou sílu, jenž vzniká v důsledku vířivosti rychlostního pole kapalné fáze a působí především na částice o velikosti menší než několik mikrometrů. Další silou, jenž se někdy zohledňuje při vícefázové simulaci, je zdánlivá setrvačná síla, která je způsobena společným pohybem tekutiny v blízkosti dispergované fáze. Tento jev má za následek dočasný zdánlivý nárůst hmotnosti částic. Zdánlivá setrvačná síla se projevuje především v systémech kapalina-plyná fáze.

Model Eulerian-Eulerian

U modelu Eulerian-Eulerian jsou jednotlivé fáze považovány za prostupující se kontinua a každý bod v systému obsahuje informaci o objemovém zlomku dané fáze. Z tohoto popisu je zřejmé, že suma objemových zlomků přes všechny fáze v libovolném bodě se vždy musí rovnat jedné.

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1 \quad (2.17)$$

Jednotlivé fáze mohou být kapalné, plynné nebo pevné a jejich celkový počet není teoreticky omezen. Pro každou fázi se řeší rovnice kontinuity a sada rovnic pro hybnost.

K výměně hybnosti mezi jednotlivými fázemi slouží mezifázové členy v těchto rovnicích. Pokud dochází k přenosu tepla nebo hmoty je třeba tuto skutečnost zohlednit v bilanci energie a hmoty.

Pro vícefázový systém je nutné zapsat rovnici kontinuity pro každou fázi zvlášť, přičemž je třeba obecně uvažovat přenos hmoty mezi jednotlivými fázemi. Rovnice kontinuity pro i -tou fázi lze zapsat jako:

$$\frac{\partial (\alpha_i \rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{v}_i) = \sum_{\substack{i \neq j \\ j=1}}^n \Gamma_{ij} \quad (2.18)$$

kde člen Γ_{ij} představuje hmotnostní tok mezi i -tou a j -tou fází vztažený na objemový element a α_i značí objemový zlomek dané fáze. Pokud však nedochází k transportu hmoty mezi fázemi, tak se rov. (2.18) zjednoduší do tvaru:

$$\frac{\partial (\alpha_i \rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{v}_i) = 0 \quad (2.19)$$

Rovnice hybnosti pro i -tou fázi, za předpokladu nulového mezifázového transportu hmoty, lze zapsat jako:

$$\frac{\partial (\alpha_i \rho_i \vec{v}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{v}_i \otimes \vec{v}_i) = -\alpha_i \nabla p + \nabla \cdot \left(\alpha_i \vec{\tau}_i \right) + \sum_{\substack{i \neq j \\ j=1}}^n \vec{R}_{ji} + \vec{f}_{ext,i} + \vec{f}_{int,i} \quad (2.20)$$

kde p je tlak sdílený mezi všemi fázemi, $\vec{\tau}_i$ je tenzor viskózního napětí, jehož konkrétní tvar závisí na typu uvažované fáze. Člen \vec{R}_{ji} představuje mezifázovou odporovou sílu mezi i -tou a j -tou fází, $\vec{f}_{ext,i}$ má význam dalších objemových sil a $\vec{f}_{int,i}$ zahrnuje povrchové síly působící na i -tou fázi vlivem ostatních fází. Všechny výše zmíněné síly jsou vztaženy na objemový element dané fáze.

Člen mezifázové odporové síly \vec{R}_{ji} v rovnici (2.20) nejvýznamněji přispívá do popisu interakce mezi jednotlivými fázemi, a proto správnost popisu tohoto člena zásadně ovlivňuje kvalitu výsledné simulace. Tuto sílu lze rozepsat jako součin koeficientu mezifázového sdílení hybnosti a relativní rychlosti mezi i -tou a j -tou fází.

$$\sum_{\substack{i \neq j \\ j=1}}^n \vec{R}_{ji} = K_{ji} (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \quad (2.21)$$

Z definice (2.21) je jasné, že platí vztah $\vec{R}_{ji} = -\vec{R}_{ij}$. Výpočet K_{ji} se obecně liší podle toho, jaké typy fází spolu interagují. Pokud se jedná o interakci kapalina-pevná fáze,

tak koeficient mezifázového sdílení hybnosti má tvar:

$$K_{fs} = \frac{3\alpha_s C_D \rho_f |\vec{v}_s - \vec{v}_f|}{4d_s} \quad (2.22)$$

Symbol d_s značí průměr částic pevné fáze a C_D je koeficient odporu, kterým se právě ovlivňuje chování odporové síly.

Za zmínku stojí fakt, že při využití modelu Eulerian-Eulerian se pevná fáze modeluje jako kapalina bez vnitřního tření. Rigoróznější popis pevné fáze přináší až model Eulerian-Granular, který je diskutován níže.

Model Eulerian-Granular

Vícefázový model Eulerian-Granular se liší od předchozího tím, že popis chování pevné fáze byl odvozen s využitím kinetické teorie, která je například známá ze statistického popisu plynů. U tohoto modelu se viskozita pevné fáze mění v závislosti na interakcích s ostatními částicemi a primární fází. Mezi nejčastější aplikace patří simulace fluidních loží nebo suspendace v mechanicky míchaných nádobách.

Bilance hybnosti pro pevnou fázi s má tvar:

$$\frac{\partial (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \otimes \vec{v}_s) = -\alpha_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot \left(\alpha_s \vec{r}_s \right) + \sum_{j=1, j \neq s}^n \vec{R}_{ji} + \vec{f}_{ext,s} + \vec{f}_{int,s} \quad (2.23)$$

Člen p_s je tlak pevné fáze, který se skládá z kinetické části a členu, který je výsledkem neelastických srážek mezi částicemi. V současnosti existuje řada modelů k výpočtu tlaku pevné fáze. Jedním z nich je model odvozený autory Lun *a kol.* (1984):

$$p_s = \alpha_s \rho_s \Theta + 2\rho_s (1 + r_s) \alpha_s^2 g_s \Theta \quad (2.24)$$

kde r_s je restituční koeficient vyjadřující míru elasticity srážek mezi částicemi. Symbol g_s představuje radiální distribuční funkci, jenž upravuje pravděpodobnost kolizí častic pevné fáze. Poslední nediskutovaným členem Θ je teplota zrnité fáze, která je úměrná velikosti střední kvadratické rychlosti náhodného pohybu častic, tedy:

$$\Theta = \frac{1}{3} \langle \vec{u} \cdot \vec{u} \rangle \quad (2.25)$$

Ve většině CFD řešičů se k určení hodnoty teploty zrnité fáze využívají algebraické modely odvozené z transportní rovnice pro tuto veličinu.

Tenzor viskózního napětí pevné fáze $\vec{\tau}_s$ v rov. (2.23) lze vyjádřit formálně stejně jako ve vztahu (2.11).

$$\vec{\tau}_s = \eta_s \left[\nabla \vec{v}_s + (\nabla \vec{v}_s)^T \right] + \left(\kappa_s - \frac{2}{3} \eta_s \right) \nabla \cdot \vec{v}_s \vec{I} \quad (2.26)$$

Tečná viskozita zrnité fáze η_s je dána součtem kolizní, kinetické a frikční části:

$$\eta_s = \eta_{s,col} + \eta_{s,kin} + \eta_{s,fr} \quad (2.27)$$

přičemž běžně využívané korelace k jejich určení byly navrženy Gidaspowem *a kol.* (1992) nebo Syamlalem a O'Brienem (1993). Dilatační viskozita κ_s zohledňuje odpor pevných částic při expanzi či kompresi. Lun *a kol.* (1984) odvodili následující vztah k jejímu výpočtu:

$$\kappa_s = \frac{4}{3} \alpha_s \rho_s d_s g_s (1 + r_s) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \quad (2.28)$$

2.2.5 Koeficient odporu

Koeficient (součinitel) odporu má zásadní vliv na velikost a charakter mezifázové odporové síly. Obecně je tento člen funkcí relativní rychlosti pohybu částic, jejich velikostí, hustotou a viskozitou tekutiny či případně dalších veličin. V současnosti existuje celá řada modelů pro koeficient odporu, které se liší podle toho, pro jaký účel byly navrženy. V této kapitole jsou především uvedeny korelace, jenž se používají při simulacích systému kapalina-pevná fáze v míchaných nádobách.

Jeden z nejznámějších modelů k výpočtu součinitele tření navrhli Schiller a Naumann (1935), kteří získali vztah (2.29) pro výpočet koeficientu odporu na základě experimentálního měření rychlosti usazování sférické částice ve stagnantním sloupci kapaliny.

$$C_{D0} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0,15 Re_p^{0,687} \right) & Re_p \leq 1000 \\ 0,44 & Re_p > 1000 \end{cases} \quad (2.29)$$

Ze vztahu (2.29) je patrné, že Schillerova-Naumannova korelace je funkcí Reynoldsova kritéria pro částici, které je definováno jako:

$$Re_p = \frac{\rho_f d_s |\vec{v}_s - \vec{v}_f|}{\eta_f} \quad (2.30)$$

Bohužel model pro koeficient odporu navržený Schillerem a Naumannem se ukázal jako nepříliš vhodný k popisu odporové síly v systémech s plně vyvinutým turbulentním prouděním, a proto řada autorů se zaměřila na úpravu této korelace.

Brucato *a kol.* (1998) měřili rychlosť usazování pevné fáze mezi dvěma proti sobě rotujícími válci (Taylorův–Couettův tok). Ze získaných výsledků následně autoři stanovili korelace pro koeficient odporu zohledňující volnou turbulenci. Naproti tomu Pinelli *a kol.* (2001) odvodili model pro koeficient odporu na základě experimentální studie suspendace v nádobě osazené skupinou míchadel. Khopkar *a kol.* (2006) upravili Brucatův vztah na základě srovnání experimentálních a simulačních výsledků získaných pomocí CFD během studie suspendace v míchané nádobě.

Všechny výše zmíněné korelace jsou shrnutы v tabulce 2.3, avšak žádná z nich není implementována v běžně dostupných CFD řešičích. Člen λ se nazývá Kolmogorovo mikroměřítko a určuje nejmenší velikost turbulentních vířů přítomných v systému, přičemž je funkcí kinematické viskozity tekutiny a rychlosti disipace turbulentní kinetické energie, viz. vztah (2.31).

$$\lambda = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (2.31)$$

Tabulka 2.3: Modely pro odporový koeficient v turbulentní oblasti proudění

Autor	Koeficient odporu	Stanovenno na základě
Brucato <i>a kol.</i> (1998)	$C_D = C_{D0} \left[1 + 8,76 \cdot 10^{-4} \left(\frac{\lambda}{d_s} \right)^3 \right]$	experimentální studie Taylorova–Couettova toku
Pinelli <i>a kol.</i> (2001)	$C_D = C_{D0} \left[0,4 \tanh \left(\frac{16\lambda}{d_s} - 1 \right) \right]^{-2}$	měření rychlosť usazování v míchací nádobě
Khopkar <i>a kol.</i> (2006)	$C_D = C_{D0} \left[1 + 8,76 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\lambda}{d_s} \right)^3 \right]$	úpravy Brucatova vztahu pro míchací nádoby

2.2.6 Turbulentní modely

Turbulentní pohyb patří k nejsložitějším a současně nejběžnějším přírodním jevům pozorovaných v proudících tekutinách. Z tohoto důvodu je turbulenci věnována mimořádná pozornost v technických aplikacích zabývající se dynamikou proudění.

Proudění v tekutinách lze obecně rozdělit na dva hlavní typy: laminární a turbulentní. Při laminárním proudění jsou jednotlivé proudnice tekutiny spolu rovnoběžné a k promíchávání prakticky nedochází. Naproti tomu pro turbulentní proudění je charakteristické intenzivní promíchávání a vysoká míra neuspořádanosti probíhajícího procesu. Významný je také fakt, že mezi laminárním a turbulentním charakterem toku se ještě vyskytuje tzv. přechodové proudění, jehož teoretický popis je velmi obtížný. Pro

kvalitativní posouzení charakteru proudění se využívá Reynoldsovo číslo (Re), které je rádově vyšší v turbulentní oblasti než v laminární.

Z pohledu numerické simulace existují tři hlavní směry, jak se vypořádat s popisem toku tekutiny v turbulentní oblasti proudění. Jedná se o:

- přímou numerickou simulaci (DNS)
- časové zprůměrování Navierových-Stokesových rovnic (RANS)
- techniku velkých vírů (LES)

Přímá numerická simulaci (DNS) Následující přístup řeší k určení proudového pole pouze rovnici kontinuity a Navierovy-Stokesovy rovnice bez využití dodatečných rovnic pro turbulentci. Toto znamená, že celá škála prostorových a časových měřítek musí být řešena přímo, a proto použitá výpočetní doména musí být dostatečně jemná. Počet potřebný buněk obsažených ve výpočetní síti roste přibližně kvadraticky s hodnotou Reynoldsova čísla, přesně s $Re^{3/4}$. Z tohoto důvodu klade technika DNS značné nároky na výpočetní prostředky a následné vyhodnocení.

Technika velkých vírů (LES) Metoda LES představuje kompromis mezi přímou numerickou simulací (DNS) a časovým zprůměrováním Navierových-Stokesových rovnic (RANS). Tato technika je založena na hypotéze, že měřítka turbulentního proudění mohou být rozdělena na velkou a malou (podsíťovou) složku. Velké víry, jakožto hlavní nositelé kinetické energie, jsou řešeny přímo, zatímco malé víry jsou modelovány. Klíčovým krokem metody je filtrování Navierových-Stokesových rovnic, což vede k odstranění malých prostorových a časových měřítek z výsledného řešení. Intenzita filtrování přímo ovlivňuje míru získaných detailů proudového pole a tedy časovou náročnost simulace. Bohužel tato technika není v současnosti implementována běžnými CFD řešiči pro využití ve vícefázových simulacích.

Časové zprůměrování Navierových-Stokesových rovnic (RANS) Principem metody RANS je rozložení okamžité hodnoty veličiny popisující proudění na složku časově zprůměrovanou a fluktuační, tedy:

$$\phi = \langle \phi \rangle + \phi' \quad (2.32)$$

Přičemž časově zprůměrovaná veličina je definovaná jako:

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \phi \, dt \quad (2.33)$$

Dosazením vztahu (2.32) do rov. (2.7) pro nestlačitelnou tekutinu se získá Reynoldsova zprůměrovaná bilance hybnosti:

$$\rho \left[\frac{\partial \langle \vec{v} \rangle}{\partial t} + \langle \vec{v} \rangle \cdot (\nabla \langle \vec{v} \rangle) \right] = -\nabla \langle p \rangle + \nabla \cdot \langle \vec{\tau} \rangle + \vec{\tau}_R + \langle \vec{f} \rangle \quad (2.34)$$

kde $\vec{\tau}_R$ je tenzor Reynoldsova napětí mající členy:

$$\tau_{R,ij} = -\rho \langle v'_i v'_j \rangle, \quad \sigma_{R,ii} = -\rho \langle (v'_i)^2 \rangle \quad (2.35)$$

Obdobným způsobem lze odvodit časově zprůměrovanou rovnici kontinuity pro nestlačitelnou tekutinu.

$$\nabla \cdot \langle \vec{v} \rangle = 0 \quad (2.36)$$

Díky časovému zprůměrování jsou malá prostorová a časová měřítka vyhlazena, a proto je tato technika méně výpočetně náročná než DNS nebo LES přístupy. Nicméně RANS technika zavádí nové neznámé proměnné (složky Reynoldsova napětí), které je potřeba vhodně určit. K jejich stanovení se zavádějí approximace a předpoklady označované jako turbulentní modely. Mezi nejznámější představitele těchto modelů patří:

- Spalart-Allmaras (1 rovnice)
- $k-\epsilon$ (2 rovnice)
- $k-\omega$ (2 rovnice)
- Reynoldsův napěťový model (7 rovnic)

Velká část turbulentních modelů (např. první tři ve výše uvedeném výčtu) je založena na tzv. Boussineqově hypotéze, která modeluje složky Reynoldsova napětí pomocí gradientů rychlosti a skalární veličiny nazývané turbulentní viskozita (η_t). Členy ve vztahu (2.35) lze poté rozepsat jako:

$$\tau_{R,ij} = \eta_t \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad \sigma_{R,ii} = 2\eta_t \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - \frac{2}{3} [\rho k + \eta_t (\nabla \cdot \vec{v})] \quad (2.37)$$

kde k je turbulentní kinetická energie. Jednou z výhod toho přístupu je relativně nízká výpočetní náročnost k určení turbulentní viskozity. Naopak mezi jeho hlavní nevýhody patří předpoklad isotropní turbulence, který nemusí být v řadě případů splněn.

Standardní k - ϵ turbulentní model pro směs

Tento model představuje první typ rozšíření klasického k - ϵ přístupu pro jednofázový tok. Jeho použití je především vhodné v případech, kdy poměr hustot jednotlivých fází je blízký jedničce. V takovýchto případech k popisu turbulentního proudění stačí využít veličiny charakterizující celou směs. Hustota směsi a vektoré pole rychlosti směsi jsou vypočteny podle vztahu (2.38) resp. (2.39).

$$\rho_m = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i \quad (2.38)$$

$$\vec{v}_m = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i \vec{v}_i}{\rho_m} \quad (2.39)$$

Turbulentní viskozita je určena ze vztahu:

$$\eta_t = \rho_m C_\eta \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.40)$$

přičemž hodnoty veličin k a ϵ jsou získány řešením příslušných transportních rovnic (2.41) a (2.42).

$$\frac{\partial (\rho_m k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m k) = \nabla \cdot \left(\frac{\eta_t}{\sigma_k} \nabla k \right) + G_k - \rho_m \epsilon \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial (\rho_m \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \epsilon) = \nabla \cdot \left(\frac{\eta_t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon \right) + \frac{\epsilon}{k} (C_{1\epsilon} G_k - C_{2\epsilon} \rho_m \epsilon) \quad (2.42)$$

Symbol G_k ve výše uvedených rovnicích má význam produkce turbulentní kinetické energie a jeho hodnota je vypočtena z rovnice:

$$G_k = \eta_t \left[\nabla \vec{v}_m + (\nabla \vec{v}_m)^\top \right] : \nabla \vec{v}_m \quad (2.43)$$

Členy $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, a C_η představují konstanty modelu a symboly σ_k resp. σ_ϵ značí Prandt-lova turbulentní čísla. Hodnoty těchto parametrů byly stanoveny na základě experimentálních měření a jsou uvedeny v tabulce 2.4.

Tabulka 2.4: Hodnoty parametrů pro standardní k - ϵ model

$C_{1\epsilon}$	$C_{2\epsilon}$	C_η	σ_k	σ_ϵ
1,44	1,92	0,09	1,0	1,3

Na závěr je třeba dodat, že existují ještě dvě běžně používané úpravy k - ϵ turbulentního modelu pro vícefázové proudění. První z nich je disperzní modifikace, která

předpokládá existenci jedné hlavní (primární) fáze, jenž významně ovlivňuje pohyb ostatních rozptýlených fází. Druhým typem úpravy je řešení sady transportních rovnic $k-\epsilon$ pro každou fázi zvlášť. Takovýto přístup je sice nejobecnější, ale také výpočetně náročnější než předchozí dvě modifikace.

2.2.7 Modelování rotujícího míchadla

Pro popis rotace míchadla ve vsádce lze v současných CFD řešičích využít jednu ze tří následujících technik:

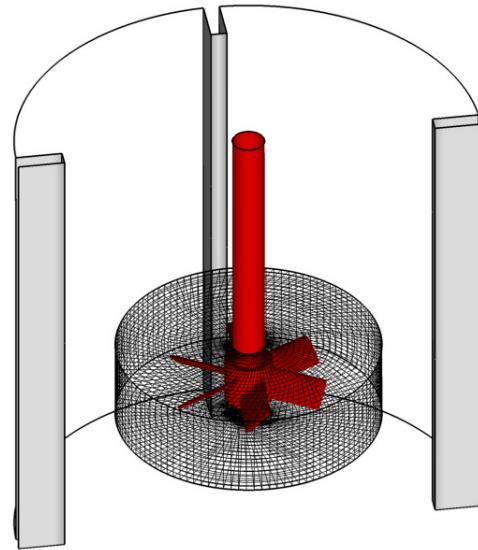
- specifikace okrajových podmínek
- metoda vícenásobných souřadnicových soustav (MRF)
- metoda klouzající sítě (SM)

Specifikace okrajových podmínek Nejstarší metoda simulace rotačního pohybu v nádobě je založena na určení okrajových podmínek pro míchadlo ze získaných experimentálních dat. Pomocí metod jako LDV (Laser Doppler Velocimetry) nebo PIV (Particle Image Velocimetry) se určí střední rychlostní pole v blízkosti lopatek, které se následně zvolí jako okrajová podmínka pro míchadlo v rámci CFD simulace. Mezi hlavní nevýhody tohoto přístupu patří především nutnost experimentálního měření a úzký vztah získaných simulačních výsledků se zkoumaným systémem. V současnosti se již tato technika téměř nepoužívá, neboť byla nahrazena modernějšími metodami diskutovanými níže.

Metoda vícenásobných souřadnicových soustav (MRF) Podstatou této metody je rozdelení výpočetní sítě na část rotační a stacionární. Rovnice kontinuity a bilance hybnosti jsou řešeny v každé doméně zvlášť se zohledněním rychlosti rotace kolem zvolené osy. V těchto modifikovaných rovnicích se vyskytují nové členy, ketré představují Corrilisovu a dostředivou sílu. Je třeba poznamenat, že rotační část s míchadlem se během simulace ve výpočetní síti nepohybuje. Díky tomuto charakteru je technika MRF především vhodná pro stacionární výpočty.

Metoda klouzající sítě (SM) Metoda klouzající sítě je nestacionární (časově závislá) technika, při které se rotační část výpočetní sítě pohybuje v průběhu simulace. Pohyb míchadla není však plně spojitý, ale je diskretizován na malé časové kroky (např.

jedna tisícina sekundy). V každém jednotlivém kroku jsou iterativně řešeny modelové rovnice, dokud není dosaženo požadovaného konvergenčního kritéria. Během těchto výpočtů jsou informace o proudění předávány přes rozhraní mezi rotační a stacionární částí. Z důvodu pohybu výpočetní sítě však buňky jednotlivých domén na rozhraní nemusí k sobě přesně přiléhat, a proto je třeba pro tento přenos využít interpolaci. Technika klouzající sítě je nejrigoróznější metoda k popisu rotace míchadla v mechanickýmíchaných nádobách, což je nicméně vykoupeno vyššími nároky na zpracování získaných výsledků a výpočetní techniku.



Obrázek 2.3: Rotační zóna kolem míchadla

2.2.8 Transport složky bez chemické reakce

Dobu homogenizace v mechanických nádobách lze experimentálně stanovit měřením časového průběhu koncentrace stopovací látky. Při použití techniky CFD se koncentrace stopovací látky v každém místě systému získá řešením transportní rovnice. Tato rovnice pro skalárni veličinu ϕ , jenž nereaguje a nepodléhá fázovým přeměnám, má tvar:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\phi - \tilde{D}\nabla\phi) = 0 \quad (2.44)$$

přičemž člen \tilde{D} značí difuzní koeficient transportované složky. Pro případ vícefázového proudění je třeba mírně modifikovat rov. (2.44), aby zohledňovala tuto skutečnost. V i -té fází, při zachování výše uvedených předpokladů, je hodnota veličiny v každém bodě systému určena vztahem:

$$\frac{\partial(\alpha_i\rho_i\phi_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i\rho_i\vec{v}_i\phi_i - \alpha_i\tilde{D}_i\nabla\phi_i) = 0 \quad (2.45)$$

3 Literární rešerše

Suspendace pevné fáze v mechanicky míchaných nádobách patří v posledních deseti-letích ke značně studovanému jevu. Za průkopníka v této oblasti je označován Zwetering (1957), jenž vyvinul empirickou korelaci pro výpočet kritické (minimální) frekvence otáčení míchadla při které již dochází ke vznosu částic. Při této frekvenci žádná částice nezůstává na dně nádoby déle než jednu či dvě sekundy. Také další autoři (Nienow, 1968; Baldi *a kol.*, 1978; Armenante *a kol.*, 1998) intenzivně experimentálně studovali mechanizmus suspendace v promíchávaných nádobách.

V posledních třech dekádách mnoho výzkumníků obrátilo svoji pozornost k počítacové dynamice tekutin (CFD) jako k prostředku pro zkoumání procesů probíhajících ve vícefázových systémech. Od té doby technika CFD nabývá na vznosu oblibě jako základní nástroje ke studiu tokového pole a distribuce částic pevné fáze v míchaných nádobách. Rané CFD simulace byly pouze zaměřeny na určení rychlostního pole v jednofázových systémech (Kresta a Wood, 1991). Experimentální metody jako LDV byly používány k určení potřebných okrajových podmínek pro modelování pohybu míchadla. Další vývoj na poli CFD se zaměřil na vývoj simulačních metod, které by kompletně odstranili tuto závislost na experimentálních datech. Tyto snahy vyústily k tvorbě komplexních technik jako je metoda vícenásobných souřadnicových soustav (MRF) nebo metoda klouzající sítě (SM), které jsou schopny popsat rotaci míchadla bez dalších dodatečných dat.

Zatímco jednofázový tok v míchaných nádobách byl podrobně zkoumán jak experimentálně, tak výpočetně. Mnohem méně prací bylo publikováno na téma vícefázového proudění v míchaných systémech. Následující kapitola shrnuje několik významných prací, které byly provedeny za účelem studie suspendace pevné fáze v mechanicky promíchávaných nádobách.

3.1 Suspendace pevné fáze v míchaných nádobách

Ljungqvist a Rasmuson (2001) simulovali dvoufázové proudění v nádobě se šestilopatkovým míchadlem se šikmo skloněnými lopatkami. Zkoumaný systém byl tvořen válcovou nádobou s plochým dnem a čtyřmi radiálními narážkami. Vnitřní průměr této nádoby

činil $T = 0,297$ m a jako vsádka byla použita voda. Zrnitou fázi tvořily skleněné částice o průměru od 150 μm do 450 μm . Pro simulaci vícefázového proudění autoři zvolili techniku Eulerian-Eulerian spolu se standardním $k-\epsilon$ turbulentním modelem. Výpočetní doména se přibližně skládala ze 52 000 buněk a díky symetrii systému pouze čtvrtina nádoby byla simulována. K popisu mezifázové odporové síly výzkumníci využili čtyři odlišné korelace pro koeficient odporu. Tyto modely navrhli autoři: Schiller a Naumann (1935), Ishii a Zuber (1979), Ihme a kol. (1972) a Brucato a kol. (1998). Získaná simulační data byla porovnána s experimentálními údaji naměřenými pomocí fázové Dopplerové anemometrie. V získaných výsledcích se mezifázový odpor projevil jako dominantní silou působící na částice pevné fáze. Na druhou stranu zdánlivá setrvačná síla (angl. virtual mass force) a Saffmanova vztlaková síla (angl. Saffman's lift force) měly po celou dobu zanedbatelný vliv na výsledky simulace. Člen mezifázové turbulentní disperze ovlivňoval řešení v blízkosti osy nádoby, avšak ve zbytku systému bylo jeho působení zanedbatelné. Závěrem autoři konstatovali, že všechny použité modely pro koeficient odporu poskytovaly velmi podobné výsledky.

Dalším způsobem jak modelovat suspendaci pevné fáze je využití vícefázového modelu Eulerian-Granular. Zmíněnou techniku využili autoři Oshinowo a Bakker (2002) ke studiu distribuce pevné fáze v míchané nádobě, kde koncentrace částic se pohybovala v rozmezí od 0,5 obj. % do 50 obj. %. Navíc v této práci stanovili výšku vznosu pevné fáze, dobu homogenizace a tzv. kvalitu suspenze, což je směrodatná odchylka koncentrace pevné fáze. Zkoumaný systém se skládal z válcové nádoby, do které bylo ponořeno čtyřlopatkové míchadlo se šikmo skloněnými lopatkami. Pro snížení výpočetní náročnosti byla simulační doména uvažována jako dvojrozměrná spolu s osovou symetrií. Pro popis turbulence byl využit standardní $k-\epsilon$ model a viskozita zrnité fáze byla vypočtena pomocí korelace navržené Syamlalem a O'Brienem (1993). Získané výsledky byly v dobré shodě s experimentálními daty, jenž byly nalezeny v literatuře. Avšak nesrovnalosti byly pozorovány mezi korelací pro minimální frekvenci otáčení míchadla potřebnou k dosažení vznosu a touto frekvencí určenou ze simulačních dat. Autoři tento rozpor připisovali faktu, že v práci byly použity vysoce účinná axiální míchadla spolu s poměrně malou světlou výškou. V této práci se směrodatná odchylka objemového zlomku pevné fáze ukázala jako užitečné měřítko míry kvality suspenze.

DerkSEN (2003) provedl sérii simulací systému kapalina-pevná fáze pomocí ma-

tematického modelu Eulerian-Lagrangian. Navíc autor využil techniku velkých víru (LES) k popisu turbulence v mechanicky míchané nádobě pomocí Rushtonovy turbíny. Míchaná nádoba měla standardní konfiguraci, jenž byla tvořena válcovou nádrží s plochým dnem o průměru $T = 0,297$ m. Jako pracovní médium byla použita voda, do které byly umístěny částice pevné fáze o velikosti $300 \mu\text{m}$. Za zmínu stojí fakt, že ve všech provedených simulacích byla koncentrace pevné fáze relativně malá (do 3,6 obj. %). Získané výsledky kvalitativně korespondovaly s experimentálním měřením, které provedli Micheletti *a kol.* (2003) pro podobný systém. Absence Saffmanovy vztlakové síly a zdánlivé setrvačné síly neměla žádný významný dopad na výsledné koncentrační profily. Autor pozoroval, že pouze pokud byly zahrnuty do simulace interakce mezi jednotlivými částicemi, tak distribuce pevné fáze v nádobě měla realistický charakter.

Výška suspenze je jednou z významných charakteristik promíchávaných systémů. Autoři Micale *a kol.* (2003) provedli sérii experimentálních měření výšky vznosu pevné fáze pro různé rychlosti otáčení míchadla v průhledné nádrži. Průměr nádoby činil $T = 0,19$ m a hladina kapaliny byla vyšší než obvykle ($H = 1,5T$), aby se usnadnilo pozorování oblasti ve které se nenacházely žádné částice. Kuličky oxidu křemičitého o velikosti v rozmezí $212\text{--}250 \mu\text{m}$ byly použity jako pevná fáze a jejich množství se lišilo od 0,45 obj. % do 14,4 obj. %. Kromě experimentů byly provedeny simulace výše popsáного systému za účelem zjištění schopnosti predikce výšky suspenzního mraku pomocí CFD. V práci byl použit vícefázový model Eulerian-Eulerian spolu s technikou klouzající sítě pro popis pohybu Rushtonovy turbíny. Díky symetrické povaze úlohy pouze jedna polovina nádoby byla simulována a výslednou výpočetní doménu tvořilo 52 992 šestistěnných buněk. Vysoce turbulentní proudění bylo modelováno pomocí homogenního $k\text{-}\epsilon$ přístupu, při kterém obě fáze sdílejí stejné hodnoty turbulentní kinetické energie a rychlosti disipace turbulentní kinetické energie. V této práci byla použita dobře známá korelace pro odporový koeficient navržená Schiller a Naumann (1935). Provedené experimenty ukázaly téměř lineární závislost mezi výškou suspenzního mraku a frekvencí otáčení míchadla. Ze získaných výsledků vyplynulo, že model Eulerian-Eulerian je schopen kvalitativně popsat výšku vznosu zrnité fáze. Na závěr autoři doporučili, pro zlepšení shody s experimentálními výsledky, zohlednění turbulence v modelu pro koeficient odporu a zahrnutí interakcí mezi jednotlivými částicemi.

Většina provedených CFD simulací systémů kapalina-pevná fáze se skládá z nádoby opatřené narážkami a jedním rychloběžným míchadlem. Avšak některí autoři se ve svých výzkumech neomezili pouze na toto uspořádání. Příkladem může posloužit studie, jenž provedli Montante a Bakker (2004). V této práci autoři zkoumali suspendaci pevné fáze ve válcové nádobě, která obsahovala čtyři míchadla, a to buď Rushtonovy turbíny, nebo míchadla typu Lightnin A310. Navíc při některých experimentech nádrž neobsahovala radiální narážky, takže docházelo k tvorbě vysoce výřivého tangenciálního proudění. K vlastní simulaci byl využit vícefázový model Eulerian-Granular spolu s korelací pro koeficient odporu, kterou navrhli Pinelli *a kol.* (2001) se zohledněním turbulentního proudění. Pro srovnání byly výpočty provedeny i s klasickým vztahem pro koeficient odporu, jenž navrhli autoři Schiller a Naumann (1935). V tomto případě však docházelo k předpovědi nižší hodnoty koeficientu odporu, což mělo za následek kratší dobu usazování částic než bylo pozorováno při experimentálních měřeních. Turbulentní model $k-\epsilon$ se ukázal jako dostatečně přesný pro případ nádrže s narážkami. Naopak pro systém bez narážek tento model vykazoval nerealistické chování rychlostního pole, a proto místo něj musel být využit výpočetně náročnější Reynoldsův napěťový model (angl. Reynold's stress model – RMS). Z výsledků vyplynulo, že zvláštní pozornost musí být věnována výběru korelace pro koeficient odporu, jenž se jeví jako kritický parametr pro správnost predikce distribuce pevné fáze.

Ochieng a Onyango (2008) studovali vliv několika odporových koeficientů na rozložení rychlosti a koncentrace pevné fáze v mechanicky míchané nádobě. Experimentální aparatura se skládala z válcové nádrže o vnitřním průměru $T = 0,378\text{ m}$, do které bylo ponořeno míchadlo Mixtec HA735 ve světlé výšce $C = 0,15T$. Jako pevná fáze byly použity částice niklu o průměrech $230\text{ }\mu\text{m}$, $400\text{ }\mu\text{m}$ a $750\text{ }\mu\text{m}$, přičemž jejich objemový zlomek v nádrži se pohyboval v rozmezí od 1 obj. % do 20 obj. %. K matematickému popisu systému kapalina-pevná fáze byl použit přístup Eulerian-Granular společně s modelem $k-\epsilon$ pro turbulenci. V této práci byly použity celkem tři odlišné korelace pro koeficient odporu. Jednalo se o vztahy, které vytvořili Schiller a Naumann (1935), Brucato *a kol.* (1998) a Gidaspow (1994), přičemž poslední jmenovaný se často používá při simulaci fluidace. Autoři poukázali na fakt, že hodnota rychlosti disipace turbulentní kinetické energie vypočtená pomocí CFD je nižší než tato hodnota určená experimentálně z příkonu míchadla. Toto snížení má za následek nižší korekci na turbulentní režim

proudění v Brucatově vztahu, a proto se tento model v řadě případů blíží korelaci dle Schillera a Neumanna. Ze získaných výsledků vyplynulo, že v průměru nejlepší shody s experimentálními údaji bylo dosaženo při použití Brucatovy korelace zohledňující volnou turbulenci. Model dle Gidasowa však překonával v kvalitě predikce Brucatova korelace při vyšších koncentracích pevné fáze (20 obj. %). Tento fakt je způsoben zohledněním objemového zlomku pevné fáze ve výše zmíněném modelu.

Další studii systému kapalina-pevná fáze v mechanicky míchané nádobě provedli autoři Kasat *a kol.* (2008). Ve své práci zkoumali především kvalitu suspenze, výšku suspenzního mraku, dobu homogenizace a distribuci pevné fáze v nádobě s Rushtonovou turbínou a čtyřmi radiálními narážkami. Na závěr získané simulační výsledky porovnali s experimentálními údaji získanými výzkumníky Yamazaki *a kol.* (2008). Zkoumaný systém se skládal z válcové nádoby o vnitřním průměru $T = 0,3\text{ m}$, jenž byla naplněna vodou do výšky $H = T$. Zrnitou fází tvorily skleněné částice o středním průměru $264\text{ }\mu\text{m}$, hustotě 2470 kg m^{-3} a objemovém zlomku 10 obj. %. Vzhledem k symetrii systému pouze polovina nádoby tvořila výpočetní doménu, která celkem obsahovala 298 000 šestistěnných buněk. K vlastní simulaci vícefázového proudění byl využit přístup Eulerian-Eulerian spolu se standardním homogenním $k-\epsilon$ modelem pro turbulenci. Pro popis mezifázové odporové síly byla využita korelace navržená autory Khopkar *a kol.* (2006), jenž vznikla modifikací Brucatova vztahu. Rotující míchadlo bylo modelováno pomocí techniky MRF a jeho frekvence otáčení byla měněna v intervalu od 2 s^{-1} do 40 s^{-1} . Ze získaných výsledků vyplynulo, že použitý výpočetní model je schopen správně kvantitativně popsát závislost mezi frekvencí otáčení míchadla a kvalitou suspenze resp. distribucí pevné fáze. Stanovená doba homogenizace se nejprve zvyšovala s rostoucí rychlosťí otáčení míchadla. Avšak po dosažení svého maxima, začala prudce klesat a při stavu homogenní suspenze nabývala téměř konstantní hodnoty. Autoři určili, že toto maximum nastává přibližně při třetinové frekvenci otáčení míchadla, která je potřebná k dosažení vznosu částic (tedy $\frac{1}{3}N_{js}$).

Výše zmíněné studie se příliš nezabývaly náběhovou fází suspendace, což je přechod od nehybné vrstvy částic do ustáleného stavu systému. Právě na numerickou simulaci tohoto děje se zaměřila skupina autorů Tamburini *a kol.* (2009). Experimentální aparatura se skládala z válcové nádoby o průměru $T = 0,19\text{ m}$ a jenž obsahovala čtyři radiální narážky o šířce $b = T/10$. Vsádku tvořila voda a částice oxidu křemičitého o celkové

konzentraci 9,6 obj. %. K míchání této suspenze byla využita Rushtonova turbína, která byla umístěna ve vzdálenosti $C = 0,017\text{ m}$ ode dna nádoby. Pro zachycení průběhu suspendace byla využita digitální kamera s vysokým rozlišením schopná vyhotovit 19 snímků za sekundu. Všechny CFD simulace byly provedeny s využitím vícefázového přístupu Eulerian-Eulerian. Turbulence byla modelována pomocí homogenního $k-\epsilon$ modelu se zohledněním turbulentní disperze. Autoři použili několik způsobů vyjádření koeficientu odporu pro popis mezifázové odporové síly. Jednalo se o korelace, které navrhli výzkumníci Clift *a kol.* (1978), Brucato *a kol.* (1998) a konstantě zvolenou hodnotu 6,01. Vytvořená výpočetní síť obsahovala 52 992 buněk, přičemž pro simulaci rotace míchadla byla využita technika klouzající sítě. Ze získaných výsledků vyplynulo, že suspendace pevné fáze v mechanicky míchané nádobě je především řízena gravitační, setrvačnou a odporovou silou. Pokud jsou tyto síly vhodně modelované, tak lze dosáhnout uspokojivé shody s experimentálními údaji, i při popisu přechodového chování suspenze. Brucatova korelace nejlépe korespondovala s experimentálními výsledky než zbylé dva přístupy. Při vyšších rychlostech otáčení míchadla se rozdíly mezi těmito modely začínaly vytrácet a po dosažení frekvence otáčení 20 s^{-1} byly již téměř zanedbatelné.

Hosseini *a kol.* (2010) studovali vliv typu míchadla, jeho světlé výšky a rychlosti otáčení na stupeň homogenizace směsi kapalina-pevná fáze v mechanicky míchané nádobě. Tato nádoba byla tvořena průhlednou válcovou nádrží s plochým dnem o vnitřním průměru $T = 0,3\text{ m}$, jenž byla navíc opatřena čtyřmi radiálními narážkami. Jako vsádka byla použita voda spolu se skleněnými kuličkami o průměru od $100\text{ }\mu\text{m}$ do $900\text{ }\mu\text{m}$. K jejímu promíchávání byly využity tři míchadla typu Lightnin (A100, A200 a A310) a jejich výška ode dna byla měněna v rozmezí od $T/6$ do $T/2$. Distribuce pevné fáze byla experimentálně stanovena pomocí elektrické odporové tomografie, přičemž po obvodu nádoby bylo rozmístěno celkem 128 čidel. Pro numerickou simulaci autoři použili vícefázový model Eulerian-Eulerian dohromady se standardním $k-\epsilon$ turbulentní modelem. Dále vytvořili pro každé míchadlo nestrukturovanou výpočetní síť, jenž v průměru obsahovala 315 000 čtyřstěnných buněk. Ve všech simulačních výpočet byla využita korelace pro koeficient odporu navržená Gidaspowem (1994). Kritická frekvence otáčení míchadla stanovená pomocí CFD byla blízko hodnotě určené ze Zwieteringova vztahu (2.1). Dále bylo dle očekávání zjištěno, že jakmile stupeň homogenizace dosáhne svého maxima, tak již další zvyšování rychlosti otáčení míchadla resp.

jeho příkonu nemá vliv na kvalitu suspenze. V CFD simulacích bylo nejvyššího stupně homogenizace dosaženo při světlé výšce míchadla $C = T/3$, což bylo v dobré shodě s provedeným experimenty. Po porovnání získaných výsledků vyplynulo, že míchadlo typu A100 dosahuje při stejných podmínkách vyššího stupně homogenizace než zbylé dva modely.

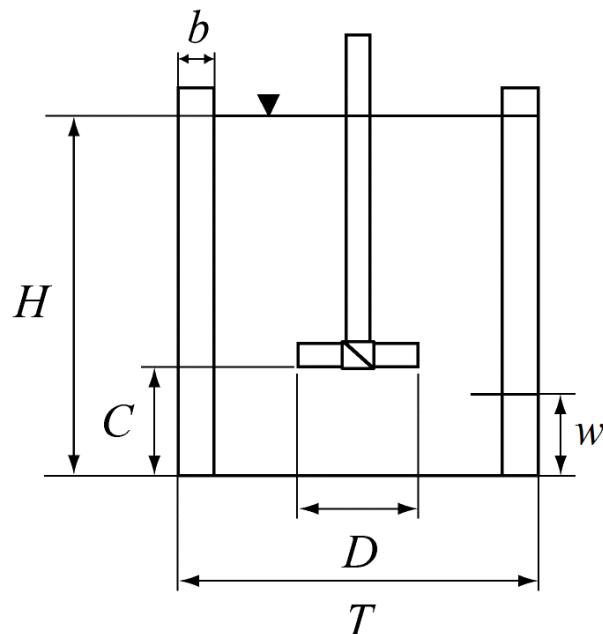
Výzkumníci Sardeshpande *a kol.* (2010) zkoumali hysterezi výšky suspenzního mraku během suspendace pevné fáze v mechanicky míchané nádobě. Pro tento jev je charakteristické, že výška vznosu částic se liší podle toho, zda frekvence otáčení míchadla byla v minulosti zvyšována, či snižována. Ke studiu toho jevu autoři využili jak svá vlastní experimentální měření, tak techniku CFD. Experimentální aparatura byla tvořena válcovou nádrží o průměru $T = 0,7\text{ m}$, která navíc obsahovala čtyři radiální narážky. Do této nádoby bylo umístěno šestilopatkové míchadlo se šikmo skloněnými lopatkami, přičemž jeho světlá výška činila $C = T/3$. Vsádka se skládala z vody a skleněných částic o průměru $50\text{ }\mu\text{m}$ a $250\text{ }\mu\text{m}$. Frekvence otáčení míchadla byla nastavována v intervalu od 2 s^{-1} do 10 s^{-1} a maximální koncentrace pevné fáze byla zvolena 7 obj. %. K experimentálnímu stanovení výšky vznosu pevné fáze autoři využili metody obrazové analýzy, při které pořizovali záznam průběhu suspendace pevné fáze v nasvícené nádobě. Navíc experimentátoři také měřili axiální rychlosť částic v nádobě pomocí ultrazvukového čidla umístěného rovnoběžně s osou hřídele. Vlastní numerická simulace byla založena na vícefázovém přístupu Eulerian-Granular a standardním turbulentním modelu $k-\epsilon$. Vytvořená výpočetní doména obsahovala celkem 501 746 šestistěnných buněk. Pro popis odporového koeficientu byly využity vztahy, jenž navrhli Brucato *a kol.* (1998) a Khopkar *a kol.* (2006). Z naměřených výsledků vyplynulo, že při nižších koncentracích pevné fáze výška suspenzního mraku vykazovala monotonií průběh v závislosti na rychlosti otáčení míchadla. V oblasti vyšších koncentrací (5 obj. % a 7 obj. %) však s rostoucí frekvencí otáčení míchadla výška mraku nejprve klesala, a až poté začala růst. Autorům se podařilo experimentálně pozorovat hysterezi výšky suspenzního mraku především při množství pevné fáze rovnu 5 obj. %. Toto zjištění posléze úspěšně potvrdily provedené CFD simulace. Navíc model pro koeficient odporu podle Khopkara vykazoval lepší shodu s experimentální výsledky než korelace navržena Brucatem.

4 Experimentální část

Experimentální studii suspendace v mechanicky míchané nádobě provedla Pavlíková (2011) v rámci své bakalářské práce na Ústavu chemického inženýrství VŠCHT Praha.

4.1 Popis experimentu

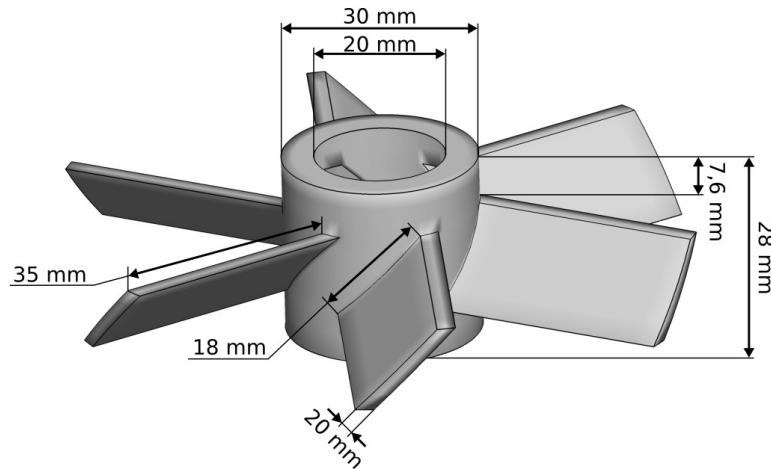
Náplní experimentu bylo měření průběhu suspendace v systému kapalina-pevná fáze spolu se stanovením doby homogenizace. K provedení experimentu byla využita válcová nádoba z plexiskla o vnitřním průměru $T = 0,29\text{ m}$ s plochým dnem, jenž byla opatřena čtyřmi radiálními narážkami o šířce $b = T/10$. Výška plnění nádoby byla zvolena $H = T$. Do této nádoby bylo ve vzdálenosti $C = T/3$ ode dna bylo umístěno šestilopatkové míchadlo se šikmo skloněnými lopatkami (úhel zkosení 45°) a celkovým průměrem $D = T/3$. Detailnější geometrie použitého míchadla je rozkreslena na obrázku 4.2.



Obrázek 4.1: Geometrie experimentu

Směr rotace hřídele byl volen tak, aby míchadlo vytvářelo axiální proudění proti dnu nádoby. Frekvence jeho otáčení se pohybovala v intervalu od 3 s^{-1} do 9 s^{-1} , což přibližně odpovídá Reynoldsovou číslu pro míchání (Re_M) od 24 500 do 73 800.

Jako vsádka byla použita voda a polyvinylpyrrolidon (PVP), což je polymer dobře rozpustný ve vodě a vykazující newtonovských chováním. Během experimentů byly



Obrázek 4.2: Geometrie míchadla

využity dvě varianty této kapaliny PVP 5 a PVP 7,5 lišící se dynamickou viskozitou (5 resp. 7,5 mPa s). Pevnou fázi tvořily červené kuličky z polyvinylchloridu (PVC) o průměru 1,02 mm. Vsádka postupně obsahovala 5, 10 a 15 obj. % těchto kuliček. Experimentálně stanovené vlastnosti kapalné a pevné fáze jsou shrnutы в tabulce 4.1.

Tabulka 4.1: Určené vlastnosti kapalné a pevné fáze

Fáze	Veličina	Hodnota	Jednotka
voda			
PVP 5	hustota	999,50	kg m^{-3}
	dynamická viskozita	1,138	mPa s
PVP 7,5	hustota	1011,44	kg m^{-3}
	dynamická viskozita	5,050	mPa s
PVC	hustota	1024,18	kg m^{-3}
	dynamická viskozita	7,615	mPa s
	průměr	1,02	mm
	mezerovitost	0,384	–

Pro určení průběhu homogenizace vsádky byla využita stopovací látka v podobě chloridu sodného. Jeho roztok o objemu přibližně 4 ml byl nastříknut na volnou hladinu mezi stěnu nádoby a hřídel míchadla. Koncentrace této látky byla měřena pomocí vodivostní sondy umístěné na opačné straně nádrže ve výšce $w = T/4$ ode dna. Výstupní analogový signál z čidla o vzorkovací frekvenci 3 Hz byl po zpracování A/D

převodníkem uložen v připojeném počítači k dalšímu zpracování. Zaznamenané hodnoty napětí byly následně přepočítány na bezrozměrnou koncentraci c^* podle vzorce:

$$c^* = \frac{c(t) - c_0}{c_\infty - c_0} \approx \frac{U(t) - U_0}{U_\infty - U_0} \quad (4.1)$$

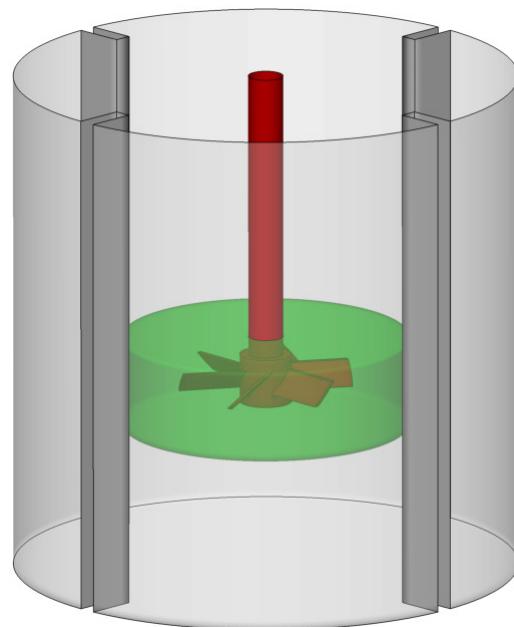
přičemž člen U značí hodnotu napětí ve zvoleném čase a význam ostatních symbolů je stejný jako ve vztahu (2.4). Doba po které dosáhla fluktuace bezrozměrné koncentrace hodnoty menší než 5 %, byla považována za dobu homogenizace (t_{mix}).

Během experimentu byly také pořizovány digitální fotografie míchaného systému lišící se koncentrací pevné fáze, použitou kapalnou vsádkou a rychlostí otáčení míchadla. Získané fotografie byly poté použity k orientačnímu stanovení výšky vznosu pevné fáze.

5 Výpočetní část

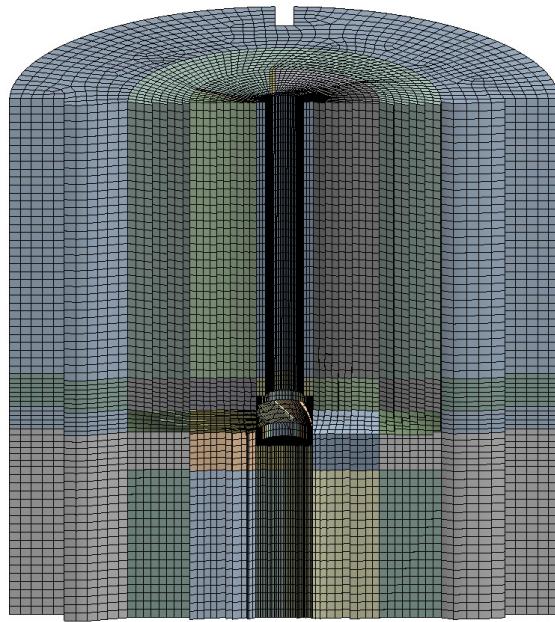
5.1 Tvorba geometrie a výpočetní sítě

Prvním krokem před každou CFD simulací je tvorba geometrie systému a její následná diskretizace (tzv. vysíťování). Výpočetní doména byla vytvořena podle geometrie experimentu uvedené v kapitole 4.1 prostřednictvím programu ANSYS DesignModeler 12.1. Pro snížení výpočetní náročnosti byla simulována pouze část nádrže obsahující kapalinu bez přítomnosti vzduchu. Míchací nádoba byla rozdělena na část rotační, kterou tvořil válec o výšce 5,2 cm a průměru 16,5 cm. Zmíněná rotační doména obsahující míchadlo a část hřídele začínala ve vzdálenosti 1,35 cm od spodní hrany míchadla. Zbývající část systému obsahující větší část hřídele, dno, stěny a narážky nádoby představovala stationární oblast. Vytvořená geometrie systému je zachycena na obrázku 5.1, kde zelenou barvou je znázorněna rotační zóna kolem míchadla.



Obrázek 5.1: Geometrie systému

Pro tvorbu výpočetní sítě byl využit program ANSYS Meshing 12.1, do kterého byla načtena geometrie nádoby vytvořená v předcházejícím kroku. Výsledná nestrukturovanou síť se skládala z 264 398 buněk o průměrném objemu 0,07 ml. Jednalo se převážně o šestistěnné buňky, přičemž pouze v oblasti pod míchadlem se vyskytovalo 132 třístěnných hranolů. Řez diskretizovanou doménou je zachycen na obrázku 5.2, ze



Obrázek 5.2: Řez výpočetní sítí

kterého si lze povšimnout, že v oblasti míchadla je síť úmyslně zahuštěna. Pro posouzení kvality vytvořené sítě existuje celá řada kritérií, avšak mezi jedno z nejpoužívanější patří tzv. šikmost (angl. skewness) definovaná jako:

$$skewness = \max \left(\frac{\beta_{\max} - \beta_e}{180 - \beta_e}, \frac{\beta_e - \beta_{\min}}{\beta_e} \right) \quad (5.1)$$

kde β_{\min} , β_{\max} značí nejmenší resp. největší úhel v buňce a β_e představuje úhel v pravidelném (ideálním) elementu. Šikmost se obecně pohybuje v intervalu od 0 do 1, přičemž nulová hodnota značí nejlepší kvalitu buňky, a naopak šikmost rovna jedné indikuje úplnou degeneraci elementu. Vybrané charakteristiky této veličiny pro vytvořenou výpočetní doménu jsou uvedeny v tabulce 5.1. Z uvedených hodnoty vyplývá, že vygenerovaná síť dosahuje výborné kvality.

Tabulka 5.1: Charakteristiky šikmosti pro vytvořenou síť

Charakteristika	Hodnota
Maximální šikmost	0,666
Průměrná šikmost	0,164
Směrodatná odchylka šikmosti	0,123

5.2 Uživatelem definované funkce

Uživatelem definované funkce (UDF) jsou moduly načítané do softwaru ANSYS FLUENT, jenž rozšiřují nebo upravují schopnosti řešiče. Například se může jednat o vytvoření vlastních počátečních a okrajových podmínek, změnu materiálových vlastností a modifikaci simulačních modelů. Pro tvorbu zdrojových souborů se využívá programovací jazyk C. Vytvořené soubory jsou následně zkompilované do dynamické knihovny.

Právě pomocí uživatelem definovaných funkcí byly implementovány modely pro koeficient odporu uvedené v tabulce 2.3 spolu s klasickým modelem dle Schillera a Neumanna (vztah 2.29). Navíc kromě korelací pro výpočet součinitele odporu byla do této knihovny naprogramována funkce pro výpočet kvality suspenze podle vztahu (2.2). Všechny vytvořené zdrojové kódy jsou uvedeny v kapitole Příloha.

5.3 Vlastní CFD simulace

Ke studiu suspendace pomocí CFD simulaci byl využit komerční software ANSYS FLUENT 12.1.4, do kterého byla načtena vytvořená výpočetní síť. Následně byly nastaveny okrajové podmínky pro jednotlivé části řešené domény. Pro všechny fyzické části nádrže (dno, stěny, narážky, hřídel a míchadlo) byla vybrána okrajová podmínka typu stěna, pro kterou platí, že rychlosť proudění na jejím povrchu je nulová. Z důvodu jednoduchosti byla pro hladinu kapaliny zvolena okrajová podmínka symetrie, jenž vyjadřuje nulovou hodnotu gradientu pro jednotlivé veličiny. Tato volba je obvyklá pro systémy, kde je pozornost věnována dějům probíhajícím uvnitř nádoby a nikoliv na mezifázovém rozhraní, což je právě případ suspendace. Pohyb rotační části domény byl v případě stacionární simulace modelován pomocí metody vícenásobných souřadnicových soustav (MRF) a pro nestacionární (dynamickou) simulaci byla použita technika klouzající sítě (SM).

Proudění v nádobě bylo považováno za izotermní, nestlačitelné a plně turbulentní. Pro popis turbulence byl využit standardní $k-\epsilon$ turbulentní model s disperzní modifikací pro vícefázový systém. Navíc během simulace byl zohledněn efekt turbulentní disperze dle doporučení autorů Ljungqvist a Rasmussen (2001) nebo Tamburini *a kol.* (2009). Z mezifázových sil byla modelována pouze odporová síla jakožto dominantní člen. Pro popis koeficientu odporu byly využity korelace dodané v podobě UDF knihovny. V pro-

vedených simulacích byla největší pozornost věnována modelu dle Khopkara, který byl navržen speciálně pro CFD simulaci suspendace v míchaných nádobách.

Pro popis vícefázového proudění v nádrží byl použit matematický model Eulerian-Eulerian, přičemž jako primární fáze byla zvolena voda nebo PVP a sekundární fázi tvořily kuličky z PVC. Při použití této techniky se pevná fáze modeluje jako ideální kapalina (bez vnitřního tření). Zmíněnou skutečnost bylo třeba zohlednit během nastavení simulace. Viskozita pevné fáze byla proto zvolena téměř nulová (10^{-10} Pa s) a jednotlivé složky tečného napětí na všech stěnách byly rovněž nastaveny na nulu. Pro porovnání byly některé výpočty provedeny s vícefázovým přístupem Eulerian-Granular. Hodnota viskozity zrnité fáze byla určena pomocí vztahů navržených Syamlalem a O'Brienem (1993). Členy jako radiální distribuční funkce, tlak pevné fáze a dilatační viskozita byly stanoveny pomocí modelů, jenž navrhli autoři Lun *a kol.* (1984).

Vlastní CFD výpočet byl proveden jako nestacionární, aby bylo možné sledovat průběh suspendace a dynamiku vzniku suspenzního mraku. Na začátku každé simulace byla na dno nádoby umístěná pevná fáze o zvolené koncentraci 5, 10 nebo 15 obj. %. Pro potřeby počáteční podmínky bylo zvolené nulové rychlostní pole spolu s hodnotou turbulentní kinetické energie rovné 10^{-3} m² s⁻² a její rychlosti disipace 10^{-3} m² s⁻³. K určení rychlostního a tlakového pole byla využita vícefázová modifikace algoritmu SIMPLE. Velikost časového kroku byla zvolena 0,001 s, přičemž v každém kroku bylo provedeno maximálně 55 iterací. Konvergenční kritérium bylo splněno pokud hodnoty reziduí všech řešených veličin byly menší než 10^{-3} . Pro sledování konvergence výpočtu byla také monitorována síla působící na narážky nádoby a průměrná hodnota koeficientu odporu v celém systému. V prvních 100 časových krocích byly použity diskretizační náhrady pouze prvního řádu a podrelaxační faktory pro tlak, hybnost a turbulentní viskozitu byly sníženy na hodnotu 0,2, 0,2 respektive 0,8. Po této době následovalo přepnutí na diskretizační náhrady druhého řádu a nastavení všech podrelaxačních faktorů na své výchozí hodnoty. Celková doba simulace činila 7 s, což se dle experimentů jevila jako dostatečná doba k ustálení tokového pole. Simulace probíhaly na počítači HP Z600 osazený dvěma procesory Intel Xeon X5570 a pamětí 24 GB s operačním systémem CentOS 5.3 x86-64. Doba výpočtu jedné reálné vteřiny trvala přibližně 4 hodiny.

Získaná rychlostní pole byla poté využita ke stanovení doby homogenizace. Stopovací

látku s fyzikálními vlastnostmi stejnými jako kapalná fáze byla na počátku simulace umístěna 2 cm po hladinu vsádky. V průběhu výpočtu byly následně zaznamenávány hodnoty objemového zlomku indikační látky v místě umístění vodivostní sondy.

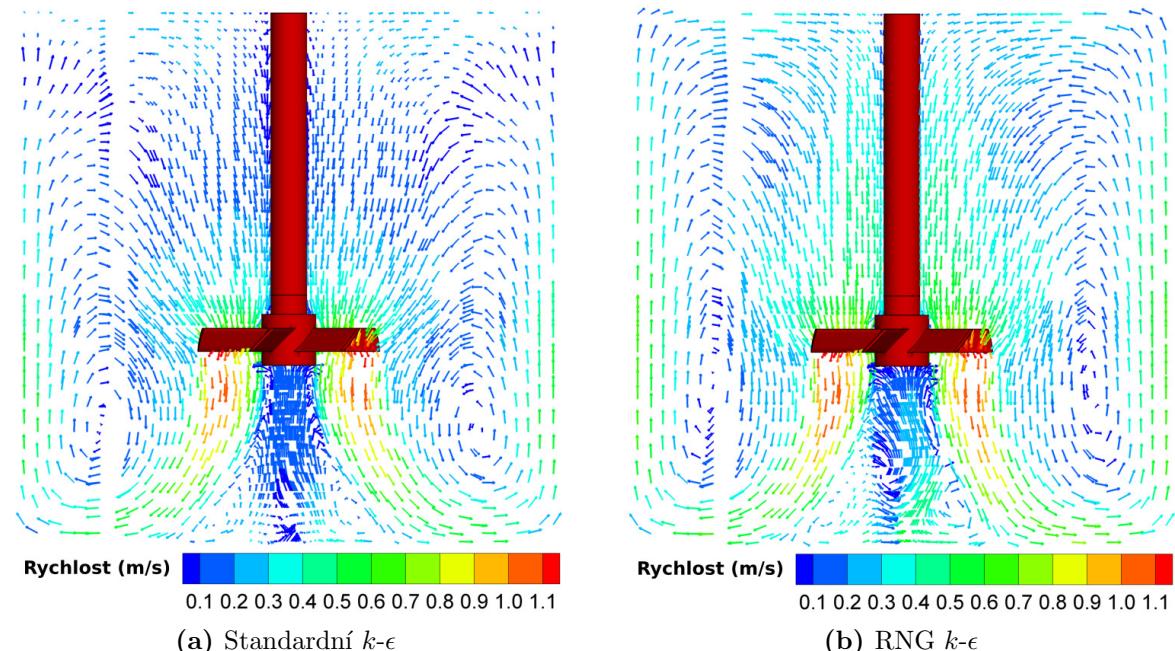
6 Výsledky a diskuze

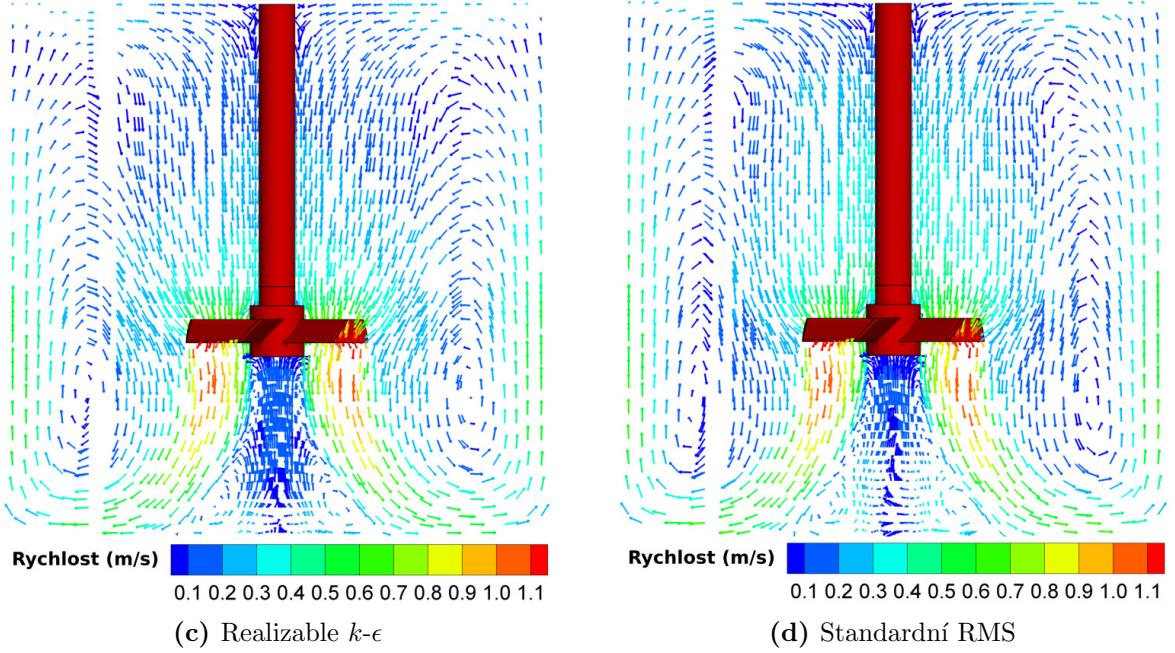
Následující kapitola shrnuje výsledky provedených CFD simulací suspendace v mechanicky míchané nádobě. Navíc, kde to situace umožňovala, byla získaná simulační data porovnána s dostupným experimentálním měřením (Pavlíková, 2011).

6.1 Rychlostní pole v nádobě

Pro porovnání vlivu zvoleného turbulentního modelu na výsledné rychlostní pole bylo provedeno několik stacionárních simulací míchaní vodné vsádky.

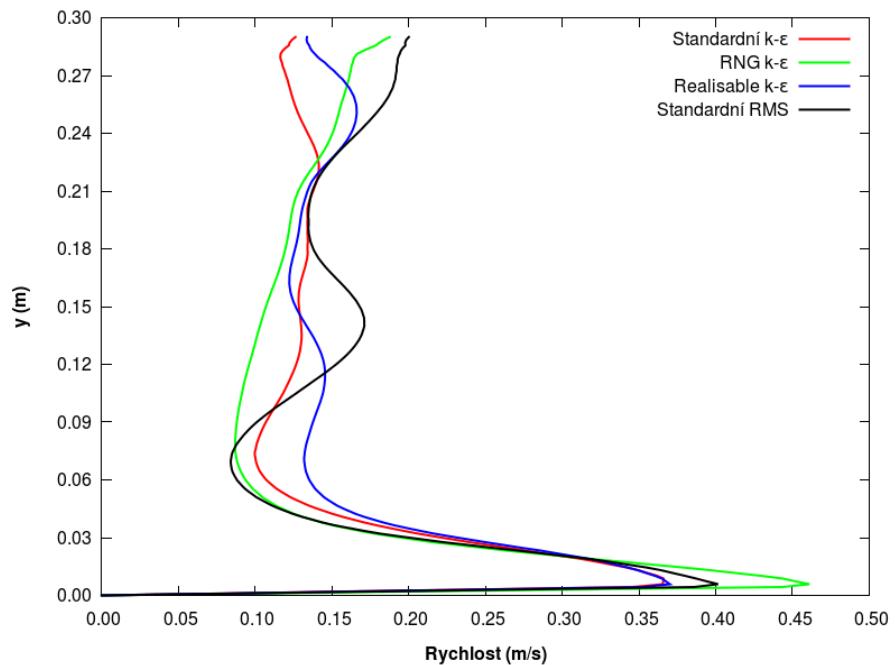
Na obrázcích 6.1 jsou znázorněna vektorová pole rychlosti kapaliny v řezu nádobou pro jednotlivé turbulentní modely a frekvenci otáčení míchadla 7 s^{-1} . Ze všech obrázků je dobře patrný vznik primární cirkulační smyčky, která je charakteristická pro axiální míchadla. Navíc si lze také povšimnout tvorby sekundárních cirkulačních smyček v prostoru pod míchadlem. Tento jev byl experimentálně pozorován například autory Hosseini *a kol.* (2010) při zvolené světlé výšce míchadla od $C = T/2$ do $C = T/6$. Důležitý je také fakt, že i při srovnání s výpočetně náročnějším Reynoldsovým napěťovým modelem (obrázek 6.1d) se jednotlivá rychlostní pole od sebe významně neliší.





Obrázek 6.1: Vektorová pole rychlosti pro různé turbulentní modely

Graf 6.1 zachycuje závislost mezi celkovou rychlosí pohybu kapaliny a vzdáleností ode dna nádoby (y) pro jednotlivé turbulentní modely. Konkrétní hodnoty pro tuto závislost byly získány ve vzdálenosti 0,5 cm podél jedné z narážek nádoby. Z grafu je dobře patrné, že u dna nádrže dochází nárůstu rychlosti tekutiny vlivem působení primární cirkulační smyčky.

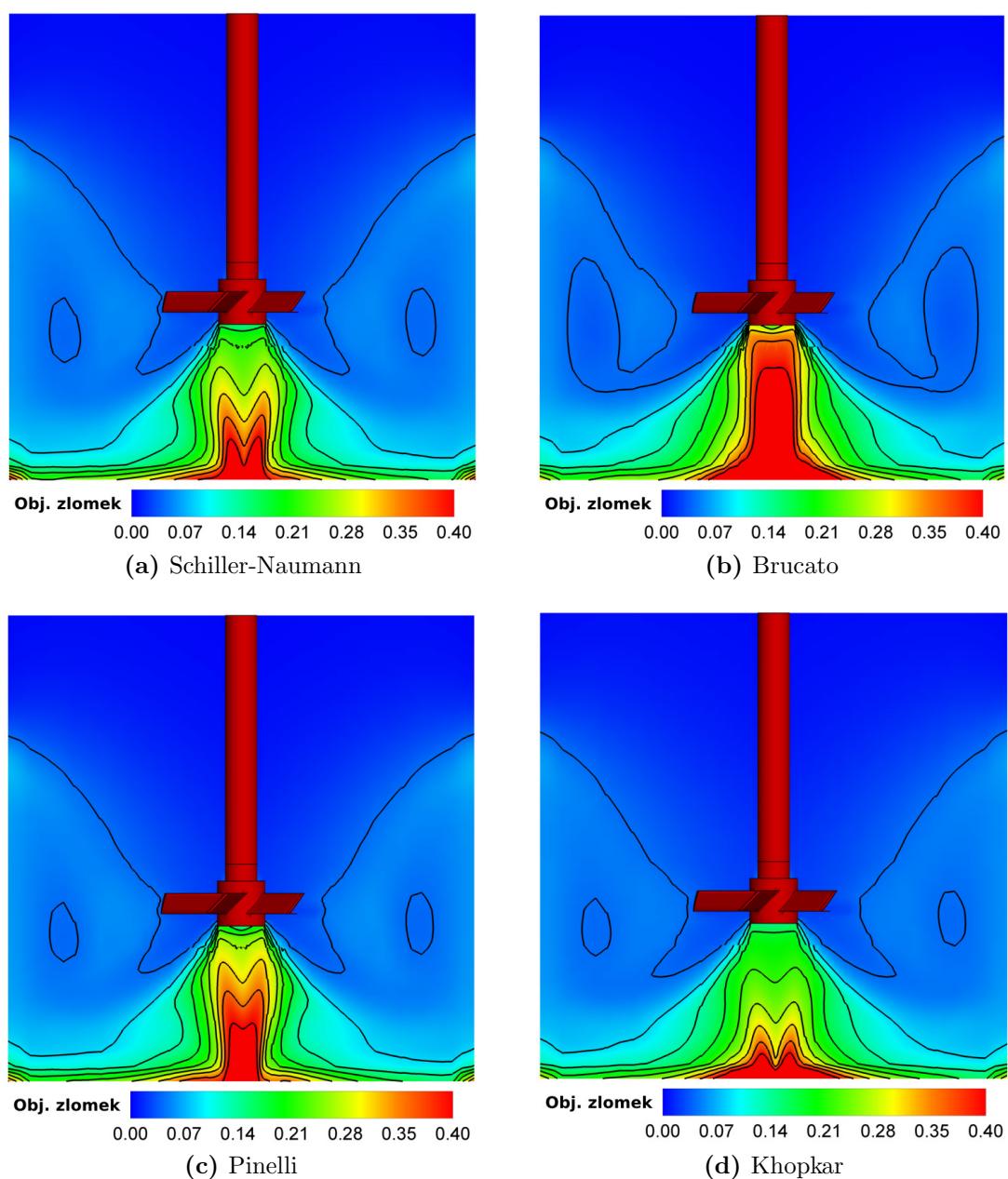


Graf 6.1: Průběh rychlosí tekutiny v nádobě

6.2 Srovnání modelů pro koeficient odporu

Jednotlivé modely pro koeficient odporu uvedené v podkapitole 2.2.5 byly porovnány během nestacionární simulace systému obsahující jako vsádku 5 obj. % kuliček z PVC a kapalinu PVP 5. Rychlosť otáčení míchadla byla v tomto případě opět nastavena na 7 s^{-1} .

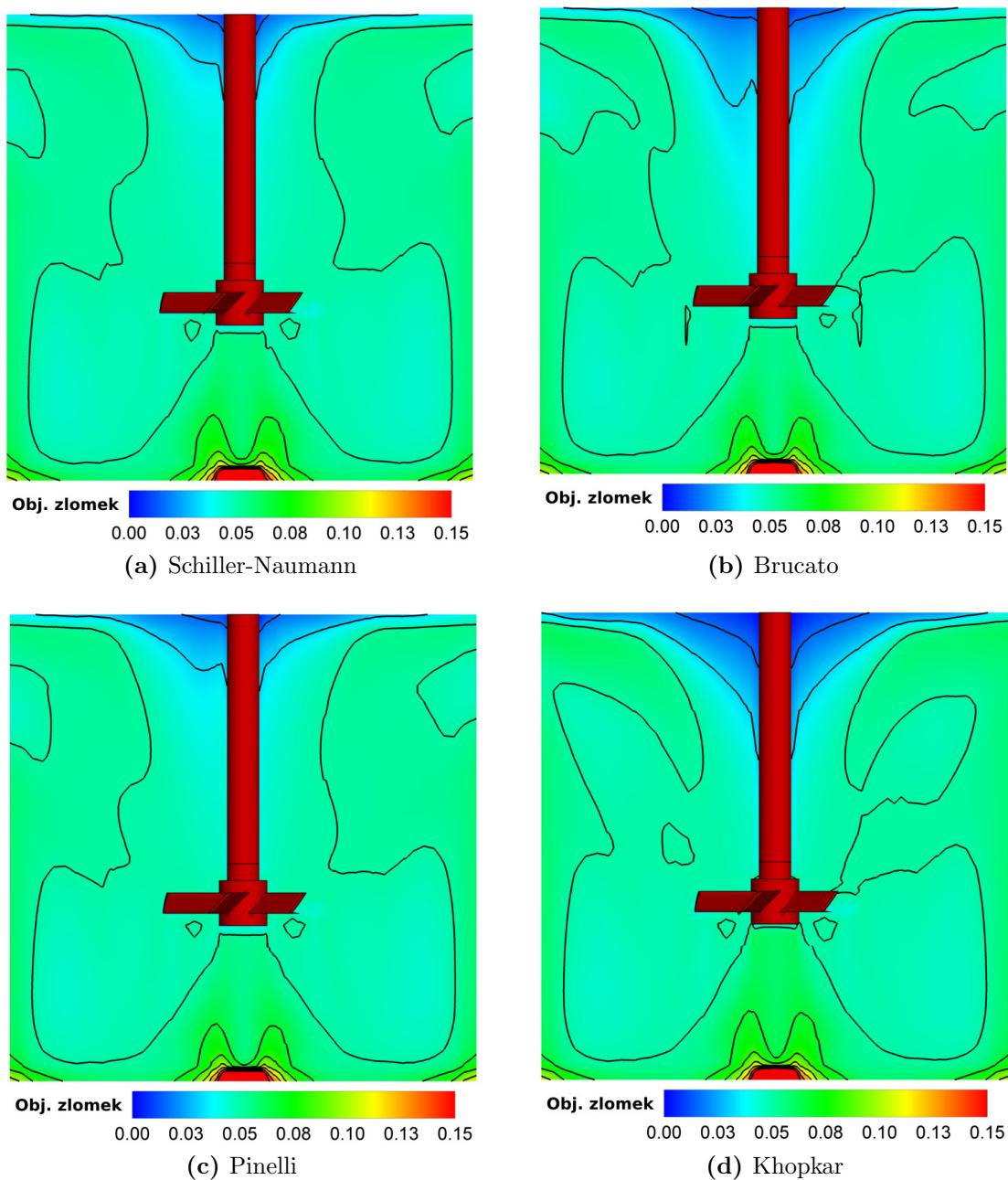
Obrázky 6.2 zobrazují kontury objemového zlomku pevné fáze v řezu míchací nádobou pro vybrané korelace koeficientu odporu. Tyto údaje byly získány v čase simulace 2 s.



Obrázek 6.2: Objemový zlomek pevné fáze v čase 2 s

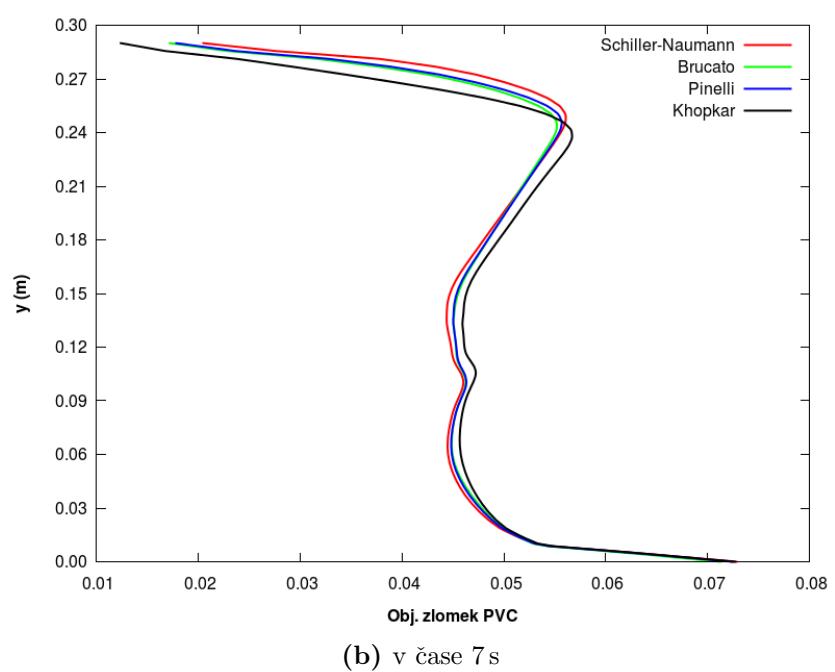
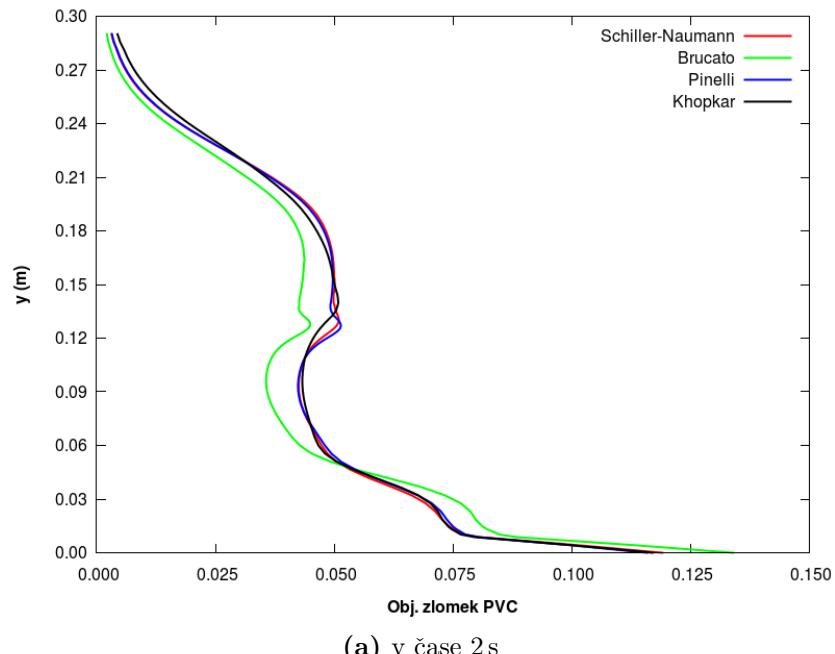
Z obrázků je dobře patrné, že přímo pod míchadlem je největší koncentrace pevné fáze vlivem působení sekundárních cirkulačních smyček, což se podařilo pozorovat i během experimentálního měření.

Série obrázků 6.3 zachycuje objemový zlomek pevné fáze v řezu nádobou, avšak v čase simulace 7 s. Částice z PVC jsou již značně rozptýleny, ale stále se pod míchadlem nachází oblasti s jejich zvýšenou koncentrací. Nicméně v celé nádobě jsou již rozdíly v distribuci pevné fáze mezi jednotlivými modely pro výpočet koeficientu odporu poměrně zanedbatelné.



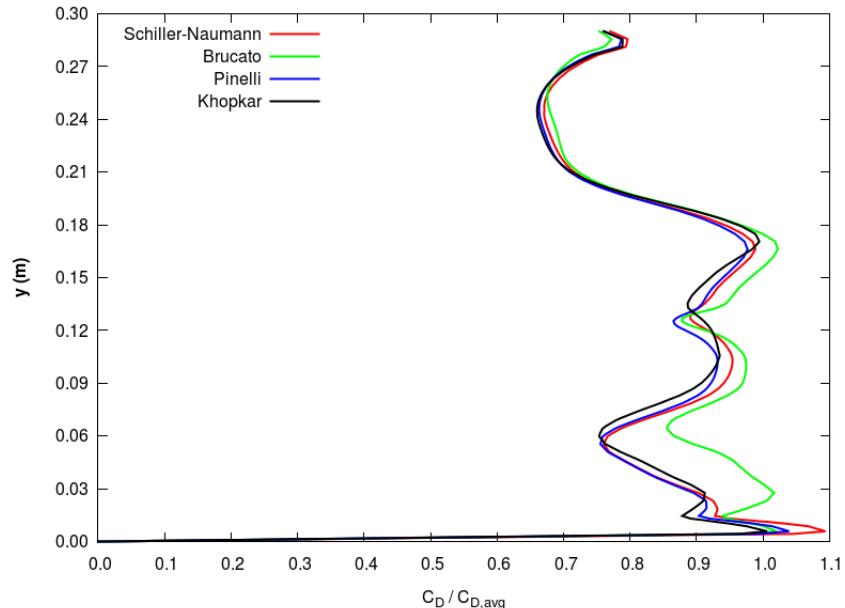
Obrázek 6.3: Objemový zlomek pevné fáze v čase 7 s

Dále jsou zde uvedeny grafické závislosti objemového zlomku pevné fáze na vzdálenosti ode dna nádoby. Z grafu 6.2a lze vidět, že s rostoucí vzdáleností se koncentrace pevné fáze postupně snižuje. Avšak grafická závislosti nemá monotonní průběh, přičemž dochází k tvorbě esovitého koncentračního profilu. Model pro koeficientu odporu navržený Brucatem předpovídá nižší koncentraci pevné fáze ve vyšší vzdálenosti ode dna než zbylé tři modely. V čase 7 s kuličky z PVC již dosáhly značného vznosu a rozdíly mezi korelacemi pro koeficient odporu se začínaly vytrácet (viz. graf 6.2b).

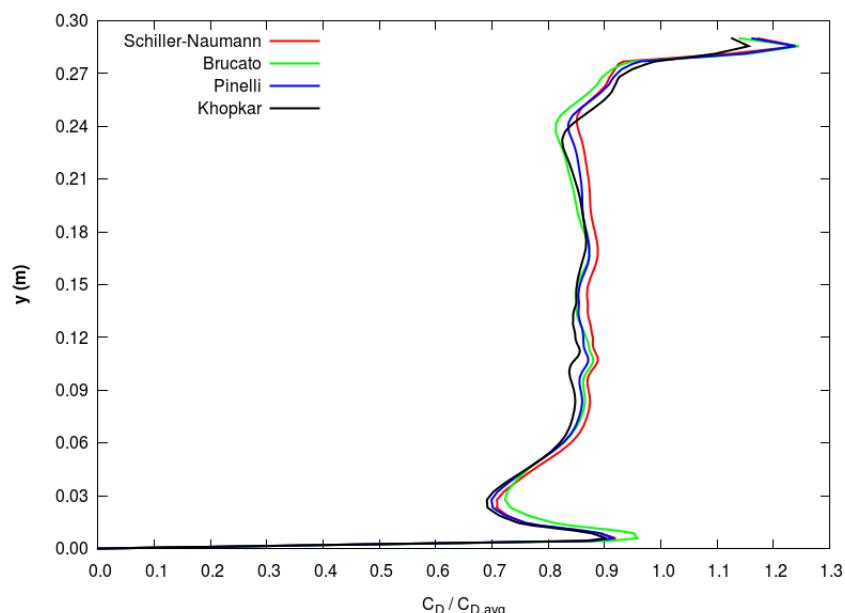


Graf 6.2: Průběh objemového zlomku pevné fáze

Poslední skupina grafů 6.3 zachycuje průběh normalizované hodnoty koeficientu odporu v závislosti na světlé výšce. Tato normalizace vznikla vydělením koeficientu odporu jeho průměrnou hodnotou v celé nádrži. Údaje v těchto závislostech byly stanoveny podél úsečky v blízkosti radiální narážky. V obou případech má koeficientu odporu podobný průběh pro různé korelace. Nicméně v čase 7 s (graf 6.3a) je zřejmé, že korelace dle Brucata se opět nejznatelněji odlišuje.



(a) v čase 2 s



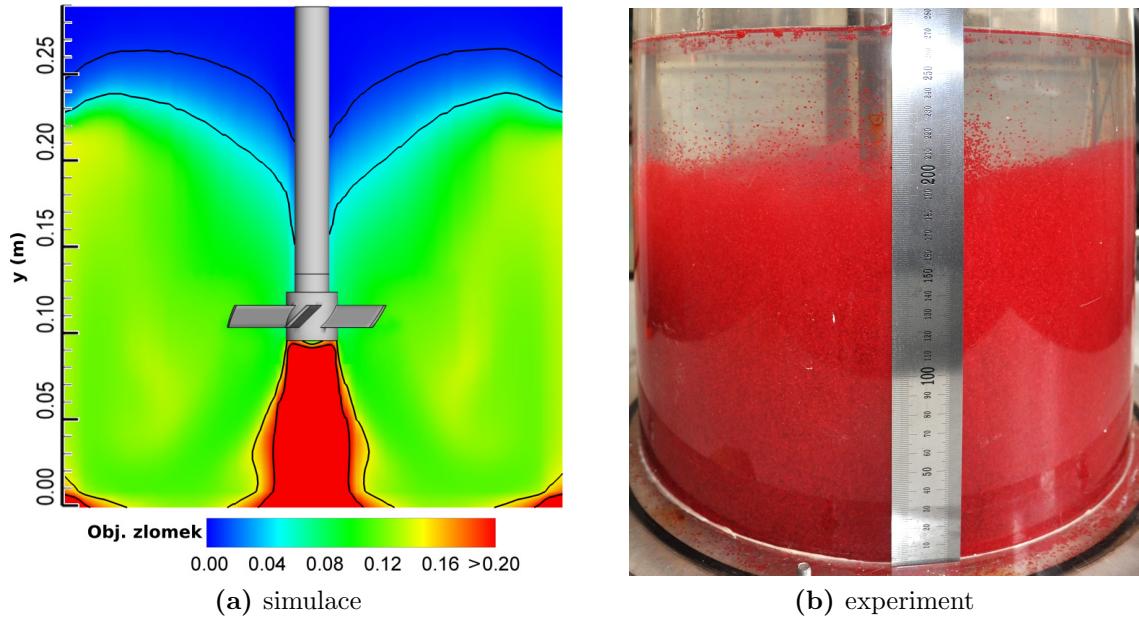
(b) v čase 7 s

Graf 6.3: Průběh hodnoty koeficientu odporu

6.3 Výška vznosu pevné fáze

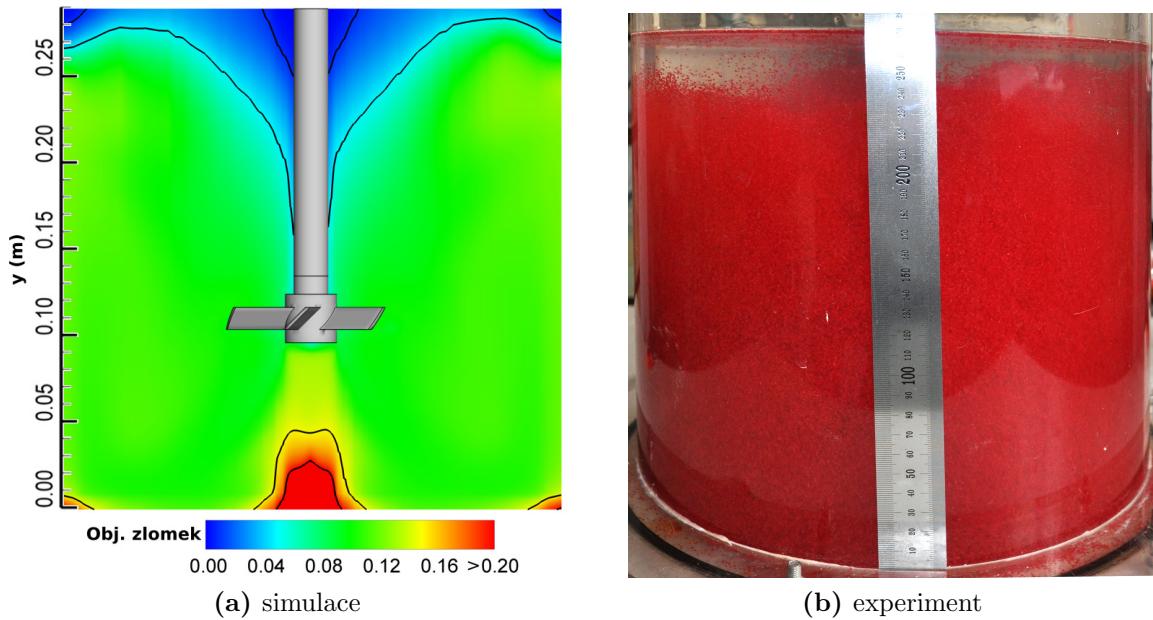
Výška suspenzního mraku byla stanovena pro systém tvořený kapalinou PVP 7,5 a pevnou fází o koncentraci 10 obj. % při třech různých frekvencích otáčení míchadla. Pro vlastní simulaci byl využit vícefázový přístup Eulerian-Eulerian spolu s Khopkarovým model pro koeficient odporu. Pro potřeby CFD výpočtů definovali Kasat *a kol.* (2008) výšku suspenzního mraku jako vzdálenost mezi dnem nádoby a nejvzdálenějším bodem, který má objemový zlomek zrnité fáze roven průměrné koncentraci v nádrži. Stejný přístup pro určení této výšky byl využit i v následující práci.

Na obrázku 6.4a je zachycen řez nádobou s konturami objemového zlomku pevné fáze získaný pomocí CFD simulace. Frekvence otáčení míchadla v tomto případě činila 4 s^{-1} . Výška vznosu kuliček z PVC byla, pomocí techniky diskutované výše, stanovena na 24,6 cm. Pro srovnání je na obrázku 6.4b ukázána fotografie pořízená během experimentu. Z ní je dobře patrný vznik rozhraní kapalina-pevná fáze přibližně ve výšce 22 cm, přičemž tato vzdálenost byla stanovena pomocí ocelového metru umístěného 2 cm ode dna nádoby.



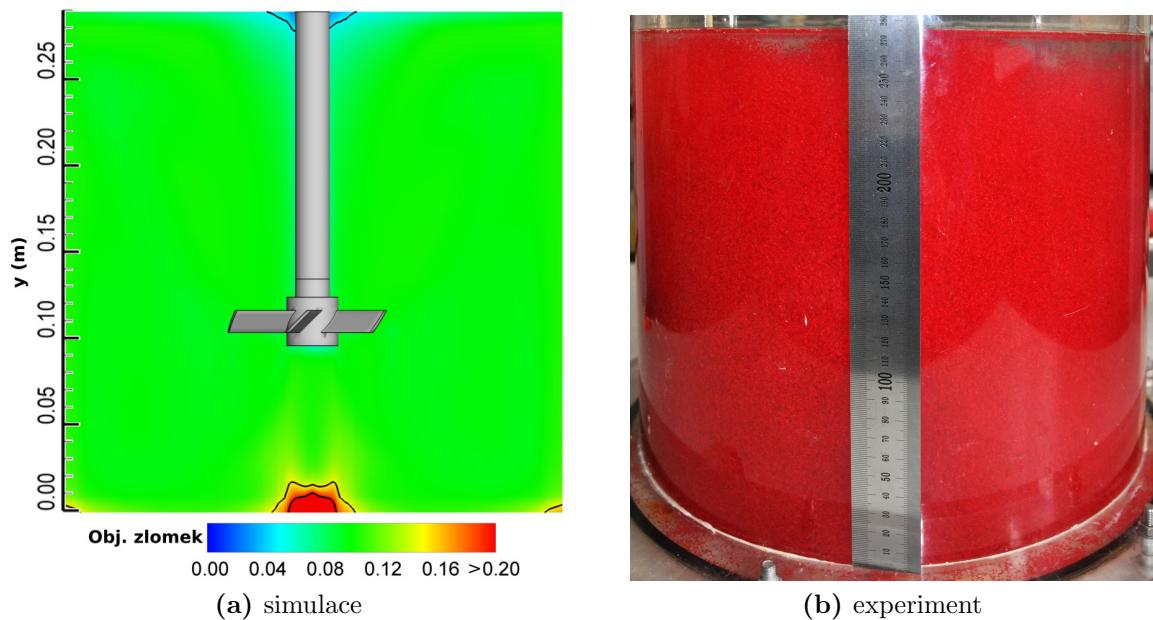
Obrázek 6.4: Vznos pevné fáze, $N = 4\text{ s}^{-1}$

Vlivem nárůstu rychlosti otáčení míchadla na 5 s^{-1} došlo ke zvýšení výšky suspenzního mraku zhruba na 27 cm (obrázek 6.5b). Zmíněný jev byl také pozorován pomocí CFD simulace, což ilustruje řez nádobou 6.5a. Výška vznosu v tomto případě činila 28,3 cm.



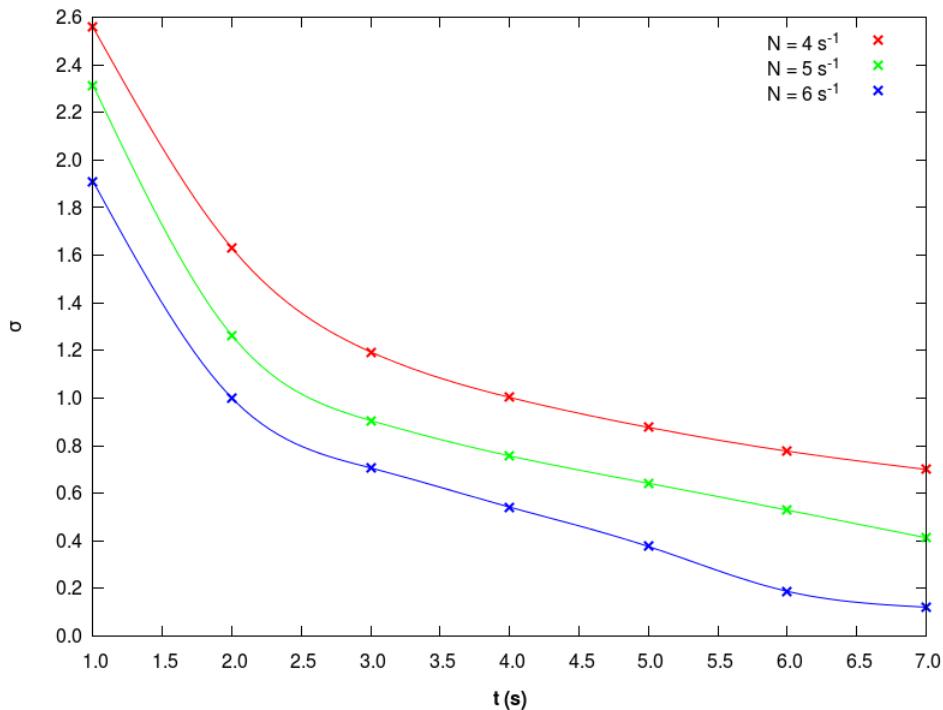
Obrázek 6.5: Vznos pevné fáze, $N = 5 \text{ s}^{-1}$

Poslední skupina obrázků 6.6 zachycuje stav suspenze při frekvenci otáčení míchadla 6 s^{-1} . Z obrázku 6.6b lze vidět, že pevná fáze je prakticky rozptýlena v celé nádrži, a proto je výška suspenzního mraku téměř totožná s výškou plnění nádoby. Obdobný závěr vyplynul i z výsledků získaných pomocí CFD simulace (obrázek 6.6a), jenž stanovila výšku tohoto mraku na 28,5 cm.



Obrázek 6.6: Vznos pevné fáze, $N = 6 \text{ s}^{-1}$

V průběhu nestacionární CFD simulace byla kromě výšky vznosu pevné určována kvalita suspenze (σ – vztah 2.2). Získané výsledky pro jednotlivé frekvence otáčení míchadla jsou uvedeny v grafu 6.4. Pro lepší přehlednost jsou tyto závislosti zobrazeny po jedné sekundě simulace. Dle očekávání se doba potřebná k dosažení stavu úplné suspendace zkracoval s rostoucí rychlostí rotace míchadla. V případě $N = 4 \text{ s}^{-1}$ tato doba přibližně činila 5,7 s, kdežto při otáčkách 6 s^{-1} se zkrátila více než dvojnásobně na zhruba (2,5 s). Navíc v čase kolem 6 s byl zaznamenán přechod do stavu homogenní suspendace pro nejvyšše zvolenou frekvenci otáčení míchadla.



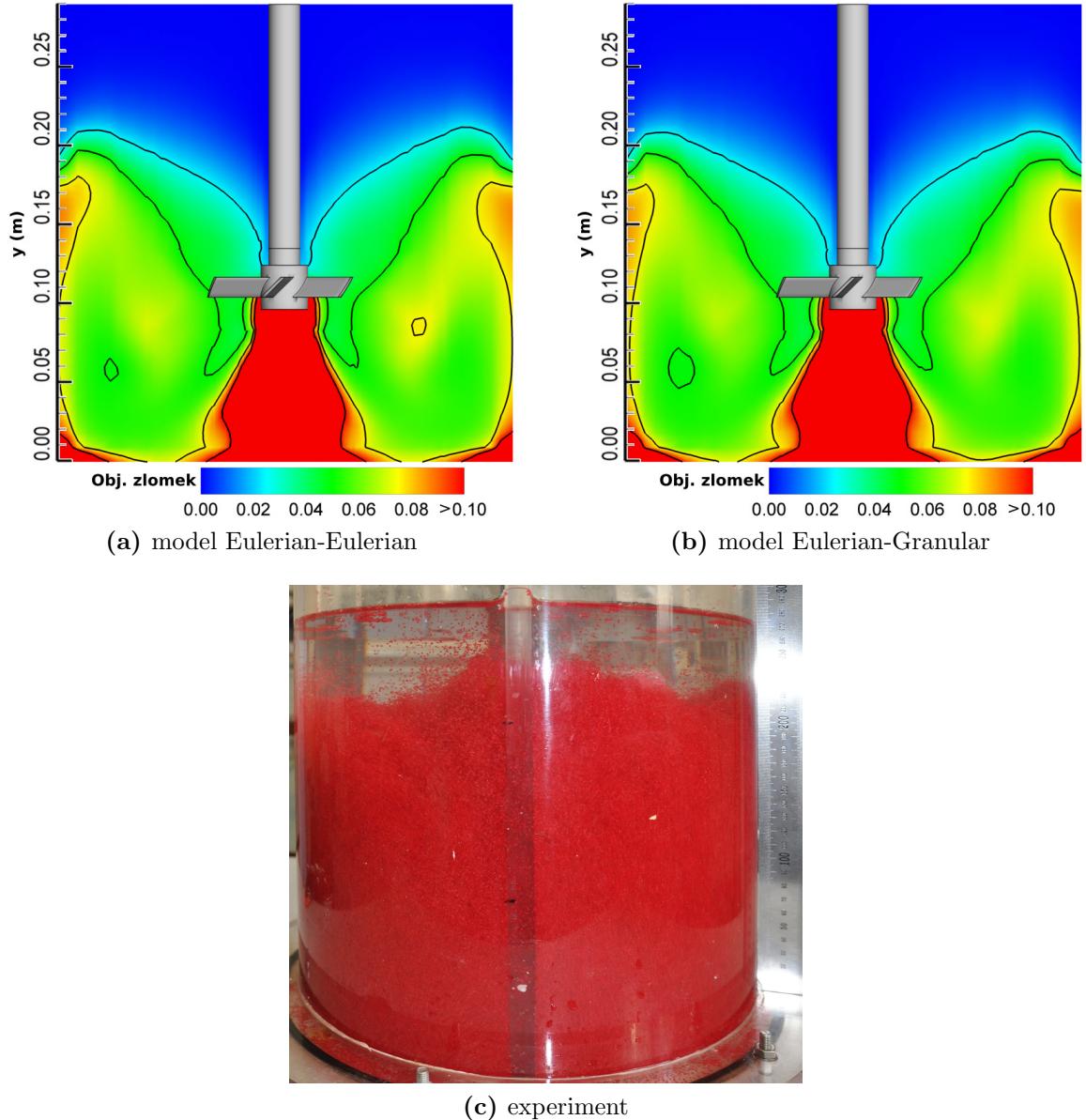
Graf 6.4: Průběh kvality suspenze

6.3.1 Srovnání modelů Eulerian-Eulerian a Eulerian-Granular

Kromě modelu Eulerian-Eulerian byl také využit přístup Eulerian-Granular pro popis vícefázového proudění v mechanicky míchané nádobě. Za účelem srovnání těchto technik byly provedeny dvě sady simulací s rozdílnou koncentrací kuliček z PVC (5 a 15 obj. %).

Skupina obrázků 6.7 zachycuje distribuci pevné fáze v systému s kapalinou PVP 7,5. Objemový zlomek PVC v tomto případě činil 5% a frekvence otáčení míchadla byla zvolena 3 s^{-1} . Obrázky 6.7a a 6.7b ukazují řezy nádobou získané pomocí CFD simulace s využitím modelu Eulerian-Eulerian resp. Eulerian-Granular. Z obdržených výsledků si

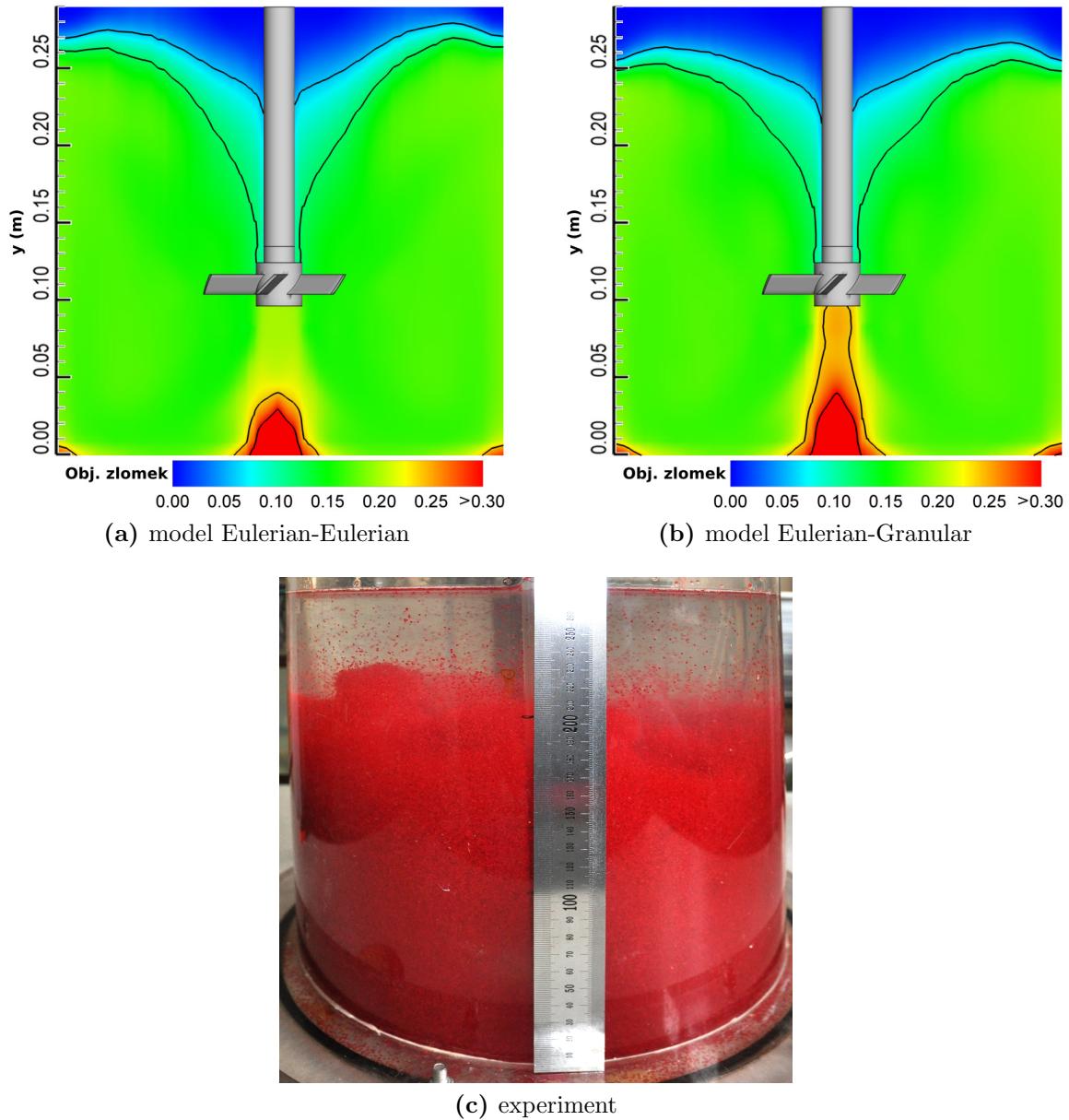
lze pověsimnout, že rozložení koncentrace pevné fáze je v obou případech velmi totožné. Tento fakt zdůrazňuje i výška suspenzního mraku, která v případě techniky Eulerian-Eulerian činila 21,9 cm a pro model Eulerian-Granular byla 21,4 cm. Experimentálně byla výška vznosu pevné fáze přibližně stanovena na 23 cm (viz. obrázek 6.7c).



Obrázek 6.7: Distribuce PVC o koncentraci 5 obj. %, $N = 3 \text{ s}^{-1}$

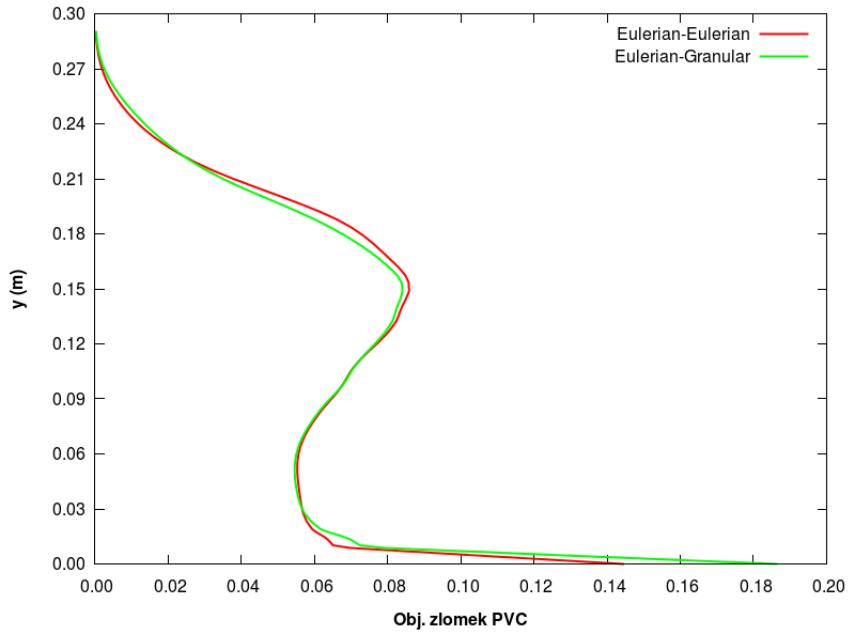
Další série obrázků 6.8 byla získána pro systém obsahující stejnou kapalnou vsádku, avšak koncentrace PVC již představovala 15 obj. %. Rychlosť otáčení míchadla byla navíc zvýšena na 5 s^{-1} . Porovnáním obrázků 6.8a a 6.8b je vidět, že v oblasti pod míchadlem a v horní části nádoby jsou nejvíce patrné rozdíly mezi jednotlivými modely. Významnější odchylky byly také pozorovány při určení výšky suspenzního mraku.

Zmíněná výška vznosu pevné fáze byla pomocí přístupu Eulerian-Eulerian stanovena na 28,0 cm a v případě modelu Eulerian-Granular byla 26,9 cm. Experimentálně určená hodnota opět přibližně činila 23 cm.

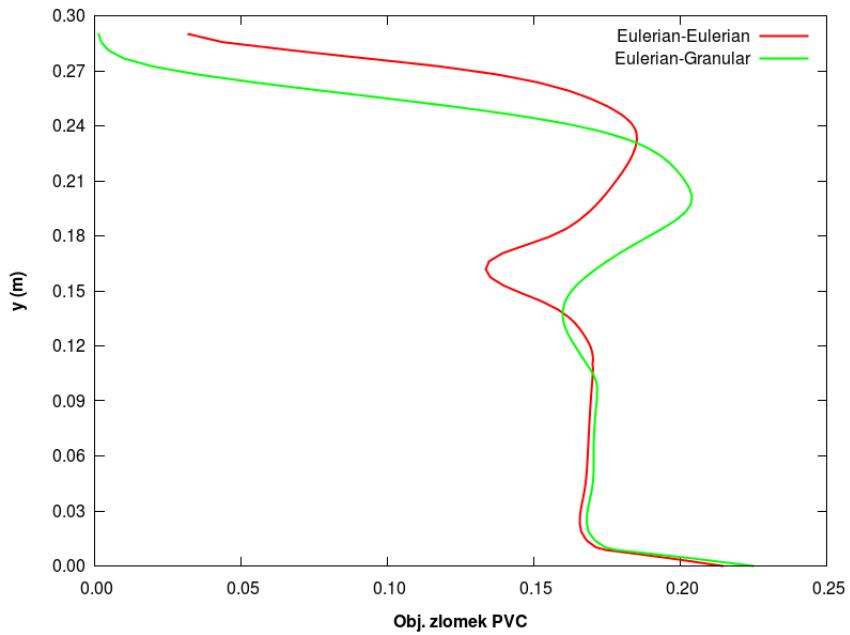


Obrázek 6.8: Distribuce PVC o koncentraci 15 obj. %, $N = 5 \text{ s}^{-1}$

Grafy 6.5 zachycují průběh objemového zlomku pevné fáze podél jedné z narážek pro dva výše uvedené případy. Jak je vidět z grafu 6.5a, tak pro koncentraci PVC rovnu 5 obj. % jsou získané průběhy pro jednotlivé vícefázové modely téměř totožné. Naopak v případě trojnásobné koncentrace (graf 6.5b) lze již pozorovat rozdíly mezi těmito modely především v horní polovině nádoby.



(a) 5 obj. % PVC, $N = 3 \text{ s}^{-1}$



(b) 15 obj. % PVC, $N = 5 \text{ s}^{-1}$

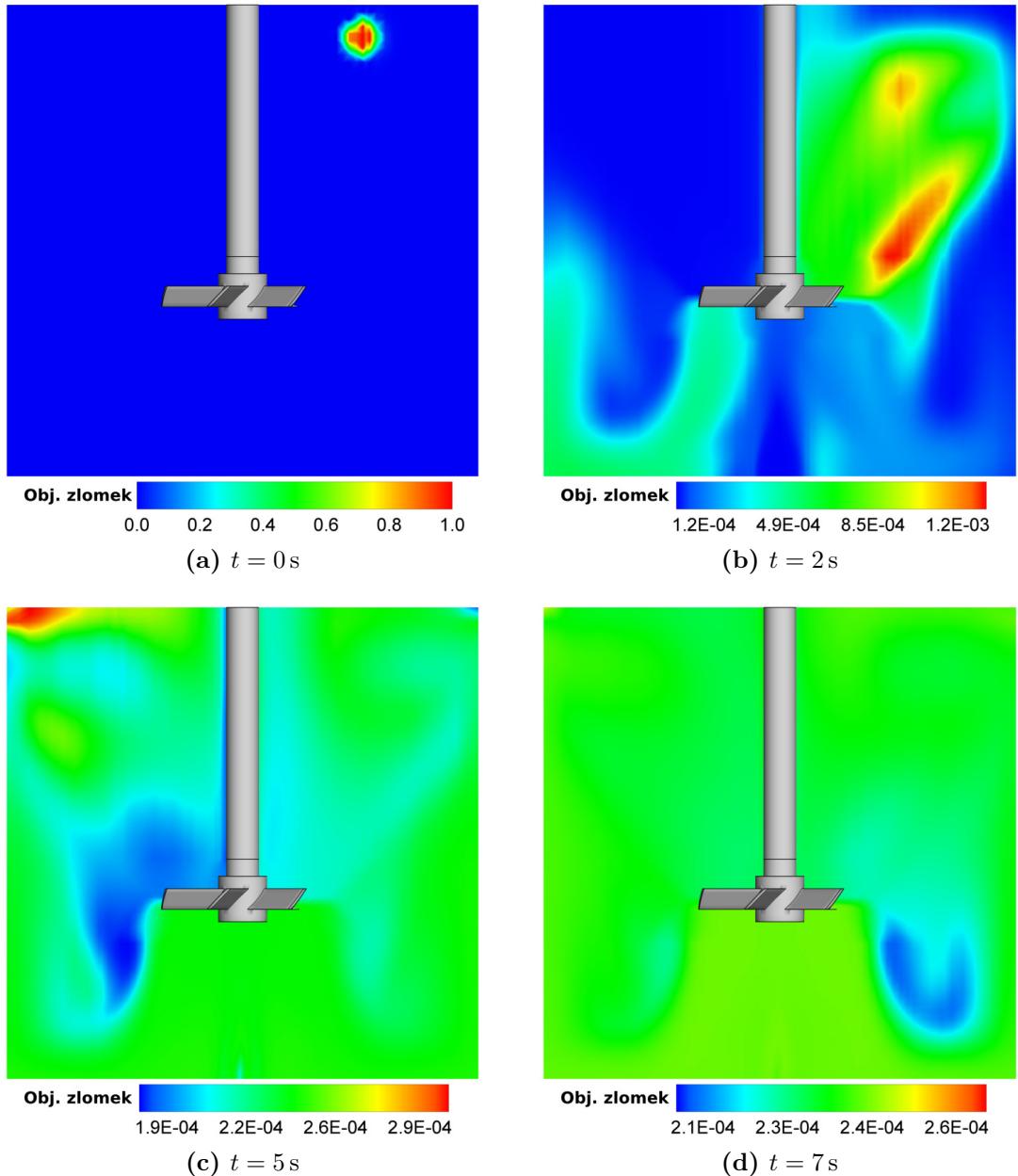
Graf 6.5: Průběh objemového zlomku pevné fáze, PVP 7,5

6.4 Doba homogenizace

Doba homogenizace v daných systémech byla vyhodnocena pomocí techniky CFD s využitím dříve napočítaných rychlostních polí. Během vlastního stanovení byla řešena pouze transportní rovnice stopovací látky, což znatelně snížilo výpočetní náročnost celého procesu. V průběhu simulací byly zaznamenávány okamžité hodnoty koncentrací stopovací látky v závislosti na čase. Z uložených dat byla poté určena doba ho-

mogenizace jako čas potřebný k ustálení této koncentrace v rozmezí $\pm 5\%$ její konečné hodnoty.

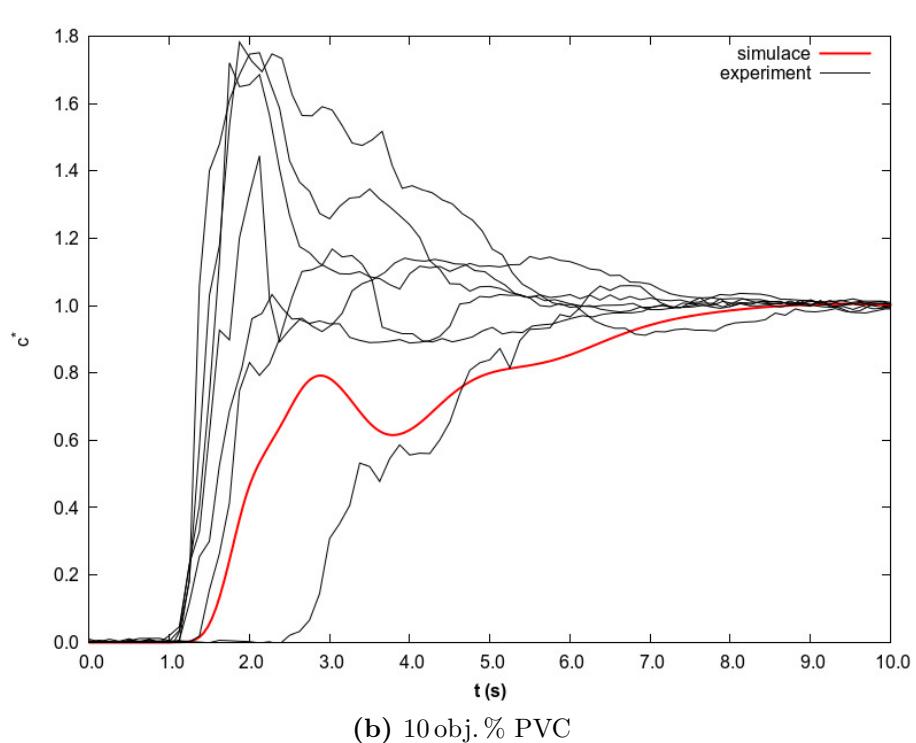
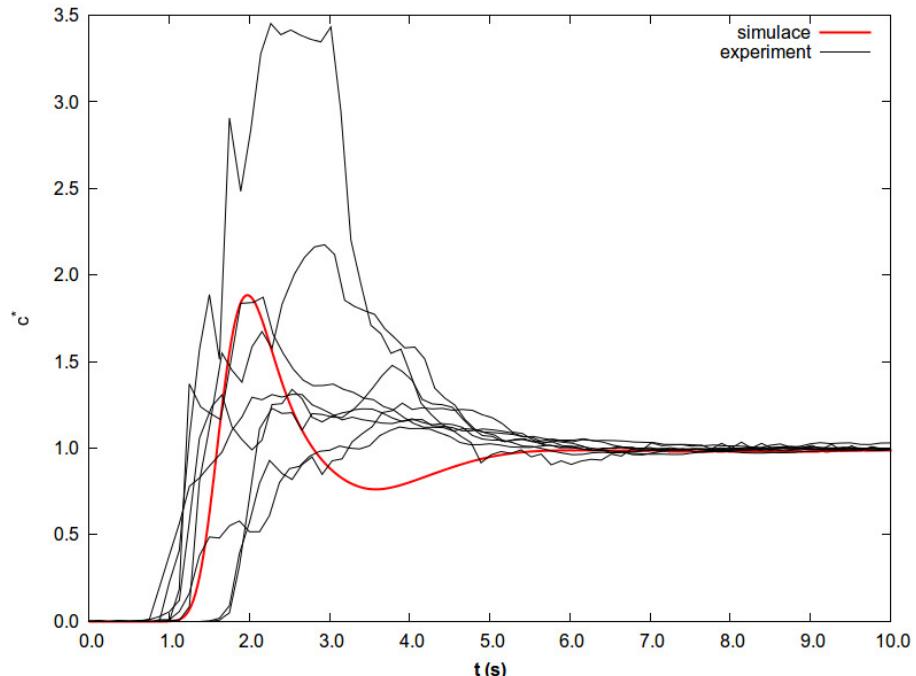
Nasimulovaný průběh homogenizace indikační látky v řezu nádobou je znázorněn na obrázcích 6.9. Jednalo se o systém tvořený vodou a pevnou fází o koncentraci 5 obj. %, přičemž frekvence otáčení míchadla činila 6 s^{-1} . Na obrázku 6.9a je dobře vidět místo, kde došlo k nadávkování stopovací látky.

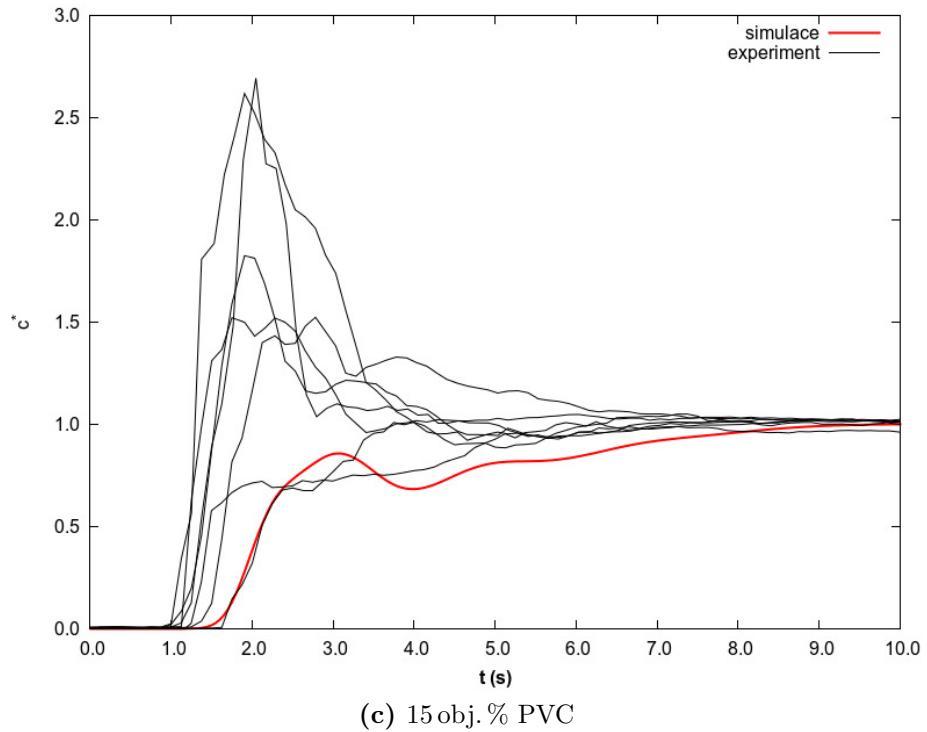


Obrázek 6.9: Koncentrace stopovací látky pro systém voda-PVC 5 obj. %, $N = 6\text{ s}^{-1}$

Následují grafické závislosti mezi bezrozměrnou koncentrací stopovací látky a dobu homogenizace určenou pomocí techniky CFD. Pro srovnání jsou v grafech vyne-

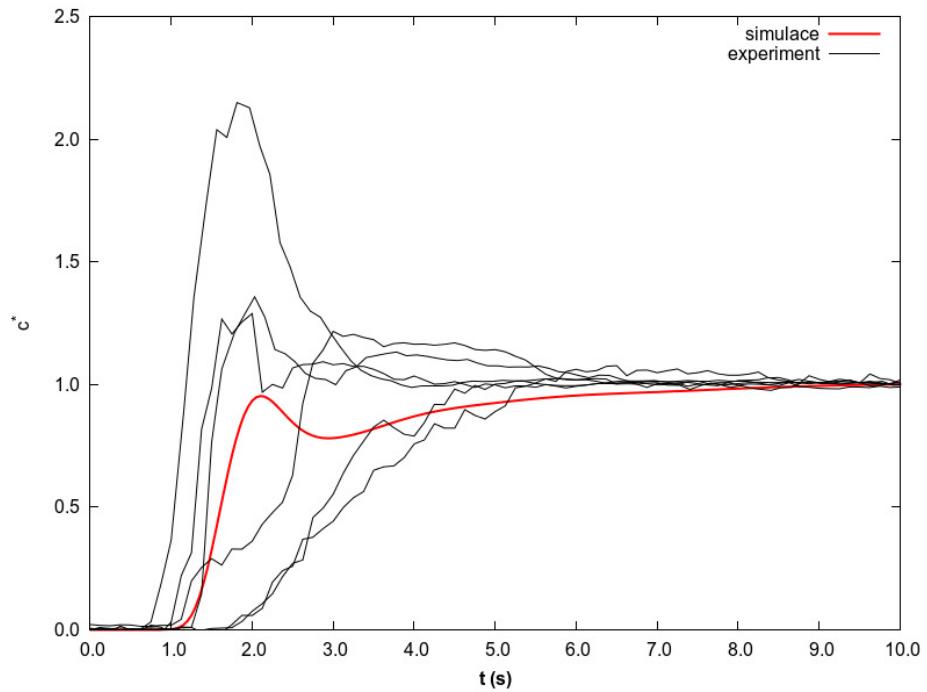
seny černou barvou experimentální údaje, které stanovila pomocí vodivostní metody Pavlíková (2011). Pro snížení potřebného výpočetního času byly především zkoumány případy s vyšší hodnotou rychlosti rotace míchadla. Grafy 6.6 zachycují výše zmíněné závislosti pro dvoufázový systém reprezentovaný vodou a kuličkami z PVC o koncentraci 5, 10 a 15 obj. % při frekvenci otáčení míchadla 6 s^{-1} . Z vyobrazených průběhů je patrná dobrá shoda mezi experimentálním měřením a výsledky simulací.





Graf 6.6: Homogenizační křivka pro vodnou suspenzi, $N = 6 \text{ s}^{-1}$

Kromě vodné vsádky byl také simulačně určen průběh bezrozměrné koncentrace indikační látky v čase pro kapalinu PVP 5 obsahující 5 obj. % pevné fáze. Frekvence otáčení míchadla v tomto případě činila 7 s^{-1} . Získaná závislost je uvedena v grafu 6.7.



Graf 6.7: Homogenizační křivka pro suspenzi PVP 5 a 5 obj. % PVC, $N = 7 \text{ s}^{-1}$

Tabulka 6.1 obsahuje hodnoty dob homogenizací pro jednotlivé systémy určené jak pomocí techniky CFD, tak na základě experimentálního měření. Ze simulačních výsledků je vidět, že s rostoucím objemovým zlomkem pevné fáze se taktéž zvyšovala doba homogenizace. Údaje získané pomocí vodivostní metody však tento vzrůstající trend úplně nepotvrdily, neboť nejkratší doba homogenizace byla naměřena pro pevnou fází obsahující 10 obj. % PVC. Kromě vodní vsádky byla také použita kapalina PVP 5, jenž díky své vyšší dynamické viskozitě vykazovala delší dobu homogenizace v porovnání s vodou. Za zmínku také stojí fakt, že hodnoty dob homogenizací určené pomocí CFD jsou téměř vždy vyšší než experimentálně naměřené. Tento jev je způsoben podhodnocením turbulentních veličin při použití k - ϵ turbulentního modelu (Ochieng a Onyango, 2008).

Tabulka 6.1: Stanovené doby homogenizace v daných systémech

Kapalina	Otáčky	PVC	Experiment	Simulace
voda				
	6 s^{-1}	5 obj. %	5,4 s	5,0 s
	6 s^{-1}	10 obj. %	5,9 s	7,2 s
	6 s^{-1}	15 obj. %	5,6 s	7,7 s
PVP 5				
	7 s^{-1}	5 obj. %	5,2 s	5,7 s

7 Závěr

Tato práce byla zaměřena na použití metody CFD k simulaci suspendace v mechanicky míchané nádobě. Hlavním cílem bylo simulačně stanovit výšku vznosu pevné fáze pro několik odlišných konfigurací promíchávaného systému. V rámci této studie bylo navíc porovnáno několik modelů pro výpočet koeficientu odporu v turbulentní oblasti proudění, který byly implementovány do řešiče ANSYS FLUENT v podobě uživatelem definovaných funkcí.

Standardní $k-\epsilon$ turbulentní model se ukázal jako dostačující k popisu proudění v nádobě osazené čtyřmi radiálními narážkami. Při porovnání jednotlivých korelací pro koeficient odporu vyplýnulo, že daný model ovlivňuje distribuci pevné fáze zvláště při vyšších objemových zlomcích dané fáze. S rostoucím stupněm homogenizace směsi se rozdíly mezi jednotlivými korelacemi vytrácely. Model navržený Brucatem pro Taylorův–Couetteovův tok však vykazoval výrazně odlišné chování, a proto ho nelze doporučit pro simulaci suspendace v mechanicky míchané nádobě. Zbývající modely provojovaly velmi podobné chování se zvyšující se dobou simulace. V případech, kdy koncentrace pevné fáze dosahovala 5 obj. % nebo 10 obj. % pevné fáze, byla výška suspenzního mraku stanovená pomocí techniky CFD v dobré shodě s experimentálně získanými výsledky. Nicméně znatelnější rozdíly mezi simulací a experimentem byly pozorovány, když objemový zlomek kuliček z PVC dosahoval 15 %. Po srovnání vícefázových modelů se ukázalo, že přístup Eulerian-Eulerian poskytuje při nižší koncentraci zrnité fáze téměř totožné výsledky jako model Eulerian-Granular. Simulačně stanové doby homogenizace byly téměř vždy vyšší v porovnání s experimentálním měřením, což je způsobeno podhodnocení turbulentních veličin u $k-\epsilon$ turbulentního modelu. Dále se simulačně podařilo potvrdit trend nárůstu doby homogenizace vlivem vyšší dynamické viskozity použité vsádky.

Další výzkum v oblasti simulace suspendace v míchaných nádobách se může zaměřit na úpravu či návrh vlastního modelu pro koeficient odporu za účelem dosažení lepší predikce výšky suspenzního mraku při vyšších koncentracích pevné fáze. V úvahu také připadá rozšíření následující práce na trojfázový systém kapalina-plyn-pevná fáze v aerovaných míchacích nádobách.

Seznam symbolů

b	šířka narážky	m
C	vzdálenost míchadla ode dna nádoby (světlá výška)	m
c	kocentrace stopovací látky	kg m^{-3}
c_i	střední koncentrace pevné fáze v daném bodě	kg m^{-3}
C_{D0}	koeficient odporu podle Schillera-Naumanna	—
C_D	koeficient odporu	—
C_H	výška suspenzního mraku	m
$C_{1\epsilon}, C_{2\epsilon}, C_\eta$	konstanty standardního k - ϵ turbulentního modelu	—
\bar{c}	střední koncentrace pevné fáze	kg m^{-3}
D	průměr míchadla	m
\tilde{D}	difuzní koeficient	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
d	průměr	m
\vec{F}_{ad}	vektor dalších sil	N
\vec{F}_B	vektor vztlakové síly	N
\vec{F}_D	vektor odporové síly	N
\vec{F}_g	vektor gravitační síly	N
\vec{F}_p	vektor síly tlakového gradientu	N
\vec{f}	vektor objemové síly působící na kontrolní objem	N m^{-3}
\vec{f}_{ext}	vektor objemové síly působící na objemový element	N m^{-3}
\vec{f}_{int}	vektor povrchové síly působící na objemový element	N m^{-3}
\vec{g}	vektor gravitačního zrychlení	m s^{-2}
g_s	radiální distribuční funkce	—
H	výška plnění nádoby	m
\vec{I}	jednotkový tenzor	—
k	turbulentní kinetická energie	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
K	koeficient mezifázového sdílení hybnosti	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$
l	charakteristická délka	m
m	hmotnost	kg
N	frekvence otáčení míchadla	s^{-1}
N_{js}	kritická frekvence otáčení míchadla	s^{-1}

p	tlak	Pa
\vec{R}	vektor mezifázové odporové síly působící na objemový element	N m^{-3}
$Re = \frac{\rho v l}{\eta}$	Reynoldsovo číslo	—
$Re_M = \frac{\rho D^2 N}{\eta}$	Reynoldsovo číslo pro míchání	—
r_s	restituční koeficient	—
S	Zwieteringova konstanta	—
t	čas	s
t_{mix}	doba homogenizace	s
T	vnitřní průměr nádoby	m
U	napětí	V
\vec{u}	vektor rychlosti náhodného pohybu částic zrnité fáze	m s^{-1}
\vec{v}	vektor rychlosti	m s^{-1}
v'_i	složka vektoru fluktuační rychlosti ve směru osy i	m s^{-1}
V	objem	m^3
W	relativní hmotnostní zlomek pevné fáze	$\text{kg}_{\text{pevná fáze}} / \text{kg}_{\text{kapalina}}$
w	vzdálenost sondy ode dna nádoby	m
x_i	prostorová souřadnice ve směru osy i	m
y	vzdálenost ode dna nádoby	m

Řecké symboly

α	objemový zlomek	—
β	úhel ve výpočetní buňce	°
Γ	hmotnostní tok vztažený na objemový element	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$
ϵ	rychlost disipace turbulentní kinetické energie	$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$
η	dynamická viskozita	Pas
$\eta_{s,col}$	kolizní viskozita zrnité fáze	Pas
$\eta_{s,kin}$	kinetická viskozita zrnité fáze	Pas
$\eta_{s,fr}$	frikční viskozita zrnité fáze	Pas
η_t	turbulentní viskozita	Pas
Θ	teplota zrnité fáze	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
ν	kinematická viskozita	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$

ρ	hustota	kg m^{-3}
σ	kvalita suspenze	—
σ_{ii}	normálové napětí ve směru osy i	Pa
τ_{ij}	tečné napětí působící ve směru osy j a kolmé k ose i	Pa
$\sigma_{R,ii}$	normálové Reynoldsovo napětí ve směru osy i	Pa
$\sigma_k, \sigma_\epsilon$	Prandtlova turbulentní čísla	—
$\tau_{R,ij}$	tečné Reynoldsovo napětí působící ve směru osy j a kolmé k ose i	Pa
$\vec{\tau}$	tenzor viskózního napětí	Pa
$\vec{\tau}_R$	tenzor Reynoldsova napětí	Pa
κ	dilatační viskozita	Pas
λ	Kolmogorovo mikroměřítko	m
ϕ	skalární veličina	—
$\langle \phi \rangle$	zprůměrovaná skalární veličina	—
ϕ'	fluktuace skalární veličiny	—

Spodní indexy

f	tekutina
i	i -tá fáze
j	j -tá fáze
l	kapalina
m	směs
p	pevná částice
s	pevná fáze
0	počáteční hodnota
∞	konečná hodnota

Zkratky

CFD	computational fluid dynamics
DNS	direct numerical simulation
FDM	finite difference method
FEM	finite element method
FVM	finite volume method

LDV	laser Doppler velocimetry
LES	large eddy simulation
MRF	multiple reference frames
PBT	pitched blade turbine
PDA	phase Doppler anemometry
PVC	polyvinylchlorid
PVP	polyvinylpyrrolidon
RMS	Reynold's stress model
RANS	Reynold's averaged Navier-Stokes equations
SM	sliding mesh
UDF	user-defined function

Literatura

- Antecký, T., 2010. Tokové nestability kapaliny v mechanicky míchané nádobě. *bakalářská práce*, ÚCHI VŠCHT, Praha
- Antecký, T., 2011. Vliv modelu pro koeficient odporu na CFD simulaci suspendace v mechanicky míchané nádobě. *studentská vědecká konference*, ÚCHI VŠCHT, Praha
- ANSYS Inc., 2010. ANSYS CFX-Solver Theory Guide. **13**, Canonsburg, Pennsylvania
- ANSYS Inc., 2009. ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide. Canonsburg, Pennsylvania
- Armenante, P. M., Nagamine, E. U., Susanto, J., 1998. Determination of correlations to predict the minimum agitation speed for complete solid suspension in agitated vessels. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **76**, 413–419
- Baldi, G., Conti, R., Alaria, E., 1978. Complete suspension of particles in mechanically agitated vessels. *Chemical Engineering Science*, **33**, 21–25
- Bittorf, K. J., Kresta, S. M., 2002. Prediction of cloud height for solid suspension in stirred tanks. *CHISA Conference Proc.*, Prague
- Bohnet, M., Niesmak, G., 1980. Distribution of solids in stirred suspensions. *German Chemical Engineering*, **3**, 57–65
- Brucato, A., Grisafi, F., Montante, G., 1998. Particle drag coefficients in turbulent fluids. *Chemical Engineering Science*, **43**, 3, 3295–3314
- Bujalski, W., Takenaka, K., Polini, S., Jahoda, M., Paglianti, A., Takahashi, K., Ni-enow, A. W., Etchells, A. W., 1999. Suspension and liquid homogenisation in high solids concentration stirred chemical reactors. *Trans. IChemE*, **77(A)**, 241–247
- Choudhury, N. H., 1997. Improved predictive methods for solids suspension in agitated vessels at high solids loadings. *disertační práce*, University of Arkansas, Arkansas
- Clift, R., Grace, J. R., Weber, M. E., 1978. Bubbles, drops, and particles. *Academic Press*, New York
- Derkson, J. J., 2003. Numerical Simulation of solid suspension in a stirred tank. *AICHE Journal*, **49**, 11, 2700–2714
- Gidaspow D., Bezburuah, R., Ding, J., 1992. Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds, Kinetic Theory Approach. *Proceedings of the 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization*, 75–82
- Gidaspow, D., 1994. Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinematic theory description. *Academic Press*, New York
- Hicks M. T., Myers, K. J., Bakker, A., 1997. Study of Solid-Liquid Cloud height in solids suspension agitation. *Chemical Engineering Communications*, **160**, 137–155

- Hosseini, S., Dineshkumar, P., Ein-Mozaffari, F., Mehrvar, M., 2010. Study of Solid-Liquid Mixing in Agitated Tanks through Computational Fluid Dynamics Modeling. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **49**, 4426–4435
- Ihme, F., Schmidt-Traub H., Brauer, H., 1972. Theoretische untersuchung über die Umströmung und den Stoffübergang an Kugeln. *Chemie Ingenieur Technik*, **44**, 306
- Ishii, M., Zuber, N., 1979, Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AICHE Journal*, **28**, 843–855
- Kasat, G. R., Khopkar, A. R., Ranade, V. V., Pandit, A. B., 2008. CFD Simulation of Liquid-Phase Mixing in Solid-Liquid Stirred Reactor. *Chemical Engineering Science*, **63**, 3877–3885
- Khopkar, A. R., Kasat, G. R., Pandit, A. B., Ranade, V. V., 2006. Computational Fluid Dynamics Simulation of Solid Suspension in Stirred Slurry Seactor. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **45**, 4416–4428.
- Kresta, S. M., Wood, P. E., 1991. Prediction of three-dimensional turbulent flow in stirred tanks. *AICHE Journal*, **37**, 448–460
- Ljungqvist, M., Rasmuson, A., 2001. Numerical simulation of the two-phase flow in an axially stirred reactor. *Trans. IChemE*, **79**, Part A, 533–546
- Lun, C. K. K., Savage, S. B., Jeffrey, D. J., Chepurniy, N., 1984. Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field. *Journal of Fluid Mechanics*, **140**, 223–256
- Micale, G., Grisafi, F., Rizzuti, L., Brucato, A., 2004. CFD simulation of particle suspension height in stirred vessels. *Chemical Engineering Research and Design*, **82**, 1204–1213
- Micheletti, L., Nikiforaki, L., Lee, K. C., Yianeeskis, M., 2003. Integral and Local Concentration Characteristics of Moderate to Dense Solid-Liquid Suspensions. *11th European Conference on Mixing*, Bamberg, Germany
- Montante, G., Bakker, A., 2004, Solid-Liquid Multiphase Flow Validation in Tall Stirred Vessels with Multiple Impeller Systems *Technical Notes*, **TN253**, Fluent Inc.
- Nienow, A. W., 1968. Suspension of solid particles in turbine agitated baffled vessels. *Chemical Engineering Science*, **23**, 1453–1459
- Ochieng, A., Onyango, M. S., 2008. Drag models, solids concentration and velocity distribution in a stirred tank. *Powder Technology*, **181**, 1–8
- Oshinowo, L. M., Bakker, A., 2002. CFD modeling of solids suspensions in stirred tanks. *Symposium on Computational Modeling of Metals, Minerals and Materials*, February 17-21, Seattle, Washington
- Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., Kresta, S. M., 2004. Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice. *Wiley-Interscience*, New York
- Pavlíková, Z., 2011. Experimentální studium homogenizace kapalin v přítomnosti pevné zrnité fáze. *bakalářská práce*, ÚCHI VŠCHT, Praha

- Pinelli, D., Nocentini, M., Magelli, F., 2001. Solids distribution in stirred slurry reactors: influence of some mixer configurations and limits to the applicability of a simple model for predictions. *Chemical Engineering Communications*, **188**, 91–107
- Ranade, V. V., 2002. Computational Flow Modelling for Chemical Reactor Engineering. *Computational Flow Modelling for Chemical Reactor Engineering*, New York
- Sardeshpande, M. V., Juvekar, V. A., Ranade, V. V., 2010. Hysteresis in Cloud Heights During Solid Suspension in Stirred Tank Reactor: Experiments and CFD Simulations. *AICHE Journal*, **56**, 11, 2795—2804
- Schiller, L., Naumann, Z., 1935. A drag coefficient correlation. *Z. Ver. Deutsch. Ing.*, **77**, 318–320
- Syamlal, M., O'Brien, T. J., 1993. MFIX Documentation: Theory Guide. *National Technical Information Service*, **1**, Springfield, Virginia
- Tamburini, A., Cipollina, A., Micale, G., Ciofalo, M., Brucato, A., 2009. Dense solid–liquid off-bottom suspension dynamics: Simulation and experiment. *Chemical Engineering Research and Design*, **87**, 587–597
- Yamazaki, H., Tojo, K., Miyamoto, K., 1986. Concentration profiles of solids suspended in a stirred tank. *Powder Technology*, **48**, 205–216
- Zwietering, T. N., 1958. Suspending of solid particles in liquid by agitators. *Chemical Engineering Science*, **8**, 244–253

Příloha

Zde jsou uvedeny vytvořené zdrojové kódy uživatelsky definovaných funkcí pro dané modely koeficientu odporu. Online repositář je možné nalézt na adrese:

<http://code.google.com/p/mixing-udfs/source/browse/#hg%2FDragCoefModels>

Models.c

```
1  /*
2   * Several drag coefficient models for solid-liquid interphase drag force
3   * - Schiller-Nauman
4   * - Pinelli
5   * - Brucato
6   * - Khopkar
7
8   * Author: Tomáš Antecký (21. 10. 2011)
9   * Developed for GCC and MS compiler
10  * Tested on Fluent 12.1.4
11  */
12
13 #include <math.h>
14 #include <udf.h>
15 #include <sg_mphase.h>
16 #include <sg.h>
17
18 #ifdef _MSC_VER /*for MS compiler*/
19 #include <float.h>
20 #define isfinite(x) _finite(x)
21 #define isnan(x) _isnan(x)
22 #endif
23
24 /*=====SETTINGS STARTS HERE=====*/
25 /*physical properties*/
26 #define DIAMETER (1.02e-3) /*diameter of the solid particle*/
27 #define RHO_L (999.5) /*density of the liquid phase*/
28 #define MUL_L (1.138e-3) /*dynamic viscosity of the liquid phase*/
29 #define NUL_L (MUL_L/RHO_L) /*kinematic viscosity of the liquid phase*/
30
31 #define SOLID_PHASE_ID (1) /*id of the solid phase*/
32
33 /*checking if computed exchange coefficient is a finite number*/
34 #define DEBUG_COEF
35
36 /*if is defined the drag coefficient is stored in user defined memory*/
37 /*don't forget to allocate memory for it under:
38   Define -> User-Defined -> Memory*/
39 #define USE_UDM
40
41 #ifdef USE_UDM
42 #define CD_UDM_NUM (0) /*the id of the drag coefficient in UDM*/
43 #endif
44 /*=====SETTINGS ENDS HERE=====*/
45
46 #ifdef DEBUG_COEF
47 #define CHECK_COEF(result) \
        if(!isfinite(result) || result < 0.0) { \

```

```

49      fprintf(stderr, "\nDetected: %e in %s:%i\n", result, __FUNCTION__,
50          __LINE__); \
51      abort(); } \
52      (void)0
53 #else
54 #define CHECK_COEF(result) (void)0
55 #endif
56 /*prototypes*/
57 real QualityOfSuspension(void);
58 real MeanVolFrac(void);
59
60 DEFINE_EXECUTE_ON_LOADING(on_load, libname)
61 {
62     Message("\nBuilded: %s %s\n", __DATE__, __TIME__);
63 }
64
65 DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY(SchillerNauman_CD, cell, mix_thread, s_col,
66                           f_col)
66 {
67     real vol_s;
68     real k_s_l;
69
70     /*cd0 is Schiller-Nauman's drag coefficient*/
71 #include "SchillerNauman.h"
72
73     /*volumetric fraction of the solid phase*/
74     vol_s = C_VOF(cell, thread_s);
75
76     k_s_l = (3./4.)*vol_s/DIAMETER*cd0*RHO_L*slip;
77
78     if(isnan(k_s_l))
79         return 0.0;
80
81     CHECK_COEF(k_s_l);
82
83 #ifdef USE_UDM
84     C_UDMI(cell, mix_thread, CD_UDM_NUM) = cd0;
85 #endif
86
87     return k_s_l;
88 }
89
90
91 DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY(Pinelli_CD, cell, mix_thread, s_col, f_col)
92 {
93     real eps;
94     real kolscale;
95     real cd;
96     real vol_s;
97     real k_s_l;
98     real pinelli;
99
100    /*cd0 is Schiller-Nauman's drag coefficient*/
101 #include "SchillerNauman.h"
102
103    /*--- Pinelli Correction ---*/
104

```

```

105  /*energy dissipation rate*/
106  eps = C_D(cell , thread_l );
107
108  /*Kolmogoroff microscale*/
109  kolscale = pow((NU_L*NU_L*NU_L)/eps , 0.25);
110
111  pinelli = 0.4*tanh(16.*kolscale/DIAMETER - 1.) + 0.6;
112
113  cd = cd0/pow( pinelli , 2.0);
114
115  /*volumetric fraction of the solid phase*/
116  vol_s = C_VOF(cell , thread_s );
117
118  k_s_l = (3./4.)*vol_s/DIAMETER*cd*RHO_L*slip ;
119
120  if(isnan( k_s_l ))
121      return 0.0;
122
123  CHECK_COEF( k_s_l );
124
125 #ifdef USE_UDM
126     C_UDMI( cell , mix_thread , CD_UDM_NUM) = cd ;
127 #endif
128
129  return k_s_l ;
130
131 }
132
133 DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY(Brucato_CD , cell , mix_thread , s_col , f_col )
134 {
135     real eps;
136     real kolscale;
137     real cd;
138     real vol_s;
139     real k_s_l;
140
141     /*cd0 is Schiller-Nauman's drag coefficinet*/
142 #include "SchillerNauman.h"
143
144     /*—Brucato Correction—*/
145
146     /*energy dissipation rate*/
147     eps = C_D(cell , thread_l );
148
149     /*Kolmogoroff microscale*/
150     kolscale = pow((NU_L*NU_L*NU_L)/eps , 0.25);
151
152     cd = cd0*(1 + 8.76e-4*pow(DIAMETER/kolscale , 3.0));
153
154     /*volumetric fraction of the solid phase*/
155     vol_s = C_VOF(cell , thread_s );
156
157     k_s_l = (3./4.)*vol_s/DIAMETER*cd*RHO_L*slip ;
158
159     if(isnan( k_s_l ))
160         return 0.0;
161
162     CHECK_COEF( k_s_l );

```

```

163
164 #ifdef USE_UDM
165     C_UDMI( cell , mix_thread , CD_UDM_NUM ) = cd ;
166 #endif
167
168     return k_s_l ;
169 }
170 }
171
172 DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY( Khopkar_CD , cell , mix_thread , s_col , f_col )
173 {
174     real eps ;
175     real kolscale ;
176     real cd ;
177     real vol_s ;
178     real k_s_l ;
179
180     /*cd0 is Schiller-Nauman's drag coefficinet*/
181 #include "SchillerNauman.h"
182
183     /*——Khopkar Correction——*/
184
185     /*energy dissipation rate*/
186     eps = C_D( cell , thread_l );
187
188     /*Kolmogoroff microscale*/
189     kolscale = pow((NU_L*NU_L*NU_L)/eps , 0.25);
190
191     cd = cd0*(1 + 8.76e-5*pow(DIAMETER/kolscale , 3.0));
192
193     /*volumetric fraction of the solid phase*/
194     vol_s = C_VOF( cell , thread_s );
195
196     k_s_l = (3./4.)*vol_s/DIAMETER*cd*RHO_L*slip ;
197
198     if( isnan( k_s_l ))
199         return 0.0;
200
201     CHECK_COEF( k_s_l );
202
203 #ifdef USE_UDM
204     C_UDMI( cell , mix_thread , CD_UDM_NUM ) = cd ;
205 #endif
206
207     return k_s_l ;
208 }
209
210 real MeanVolFrac( void )
211 {
212     Domain* d;
213     Thread *t;
214     cell_t c;
215     unsigned int numOfCells;
216     real totalVolume;
217     real sumVolFrac;
218     real cellVol;
219
220     numOfCells = 0;

```

```

221     totalVolume = 0.0;
222     sumVolFrac = 0.0;
223     d = Get_Domain(1);
224
225     thread_loop_c(t,d)
226     {
227         begin_c_loop(c,t)
228         {
229             numOfCells++;
230             cellVol = C_VOLUME(c,t);
231             totalVolume += cellVol;
232             sumVolFrac += cellVol*C_VOF(c, THREAD_SUB_THREAD(t,
233                                         SOLID_PHASE_ID)); /*1 - secondary phase = solid phase*/
234         }
235         end_c_loop(c,t)
236     }
237
238     return (sumVolFrac / totalVolume);
239
240 }
241
242 real QualityOfSuspension()
243 {
244     Domain* d;
245     Thread *t;
246     cell_t c;
247     real frac;
248     unsigned int numOfCells;
249     real avgVolFrac;
250     real parcSum;
251
252     numOfCells = 0;
253     avgVolFrac = MeanVolFrac();
254     parcSum = 0.0;
255     d = Get_Domain(1);
256
257     thread_loop_c(t,d)
258     {
259         begin_c_loop(c,t)
260         {
261             numOfCells++;
262             frac = C_VOF(c, THREAD_SUB_THREAD(t, SOLID_PHASE_ID));
263
264             parcSum += pow(frac/avgVolFrac - 1.0, 2.0);
265
266         }
267         end_c_loop(c,t)
268     }
269
270     return sqrt(parcSum/numOfCells);
271
272 }
273
274 /*compute and display on demand quality of suspension*/
275 /*Define -> User-Defined -> Execute on Demand*/
276 DEFINE_ON_DEMAND(QA_of_suspension)

```

```

278 {
279     real qa;
280
281     qa = QualityOfSuspension();
282
283     Message0("\nQualityOfSuspension: %f\n", qa);
284 }
```

SchillerNauman.h

```

1 Thread* thread_l;
2 Thread* thread_s;
3
4 real slip_x;
5 real slip_y;
6 real slip_z;
7 real slip;
8
9 real reyp;
10 real cd0;
11
12 /* liquid phase - primary */
13 thread_l = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, s_col);
14 /* solid phase - secondary */
15 thread_s = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, f_col);
16
17 slip_x = C_U(cell, thread_l) - C_U(cell, thread_s);
18 slip_y = C_V(cell, thread_l) - C_V(cell, thread_s);
19 slip_z = C_W(cell, thread_l) - C_W(cell, thread_s);
20
21 /* Euclidean norm of slip velocity */
22 slip = sqrt(slip_x*slip_x + slip_y*slip_y + slip_z*slip_z);
23
24 /* relative Reynolds number for the primary phase */
25 reyp = RHO_L*slip*DIAMETER/MU_L;
26
27 /* drag coefficient */
28 /* Schiller-Nauman */
29 if(reyp > 1000.)
30     cd0 = 0.44;
31 else
32     cd0=24.0*(1.0+0.15*pow(reyp, 0.687))/reyp;
```