

Д. А. Котельников (магистрант), Р. Ф. Ахметов (к.т.н., доц.),
Э. Г. Теляшев (д.т.н., зав.каф.), А. Ю. Котельникова (асс.), А. Р. Набиева (к.т.н., доц.)

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРЕГУЛЯРНЫХ НАСАДОЧНЫХ КОНТАКТНЫХ УСТРОЙСТВ СРЕДСТВАМИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
кафедра газохимии и моделирования химико-технологических процессов.
450062, г. Уфа, ул. Космонавтов 1; e-mail: dkotel@outlook.com

D. A. Kotelnikov, R. F. Akhmetov, E. G. Telyashev, A. Yu. Kotelnikova, A. R. Nabieva

SIMULATION OF IRREGULAR NOZZLE OF THE CONTACT DEVICES BY MEANS OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

Ufa State Petroleum Technological University
1, Kosmonavtov Str., 450062, Ufa, Russia; e-mail: dkotel@outlook.com

Представлены результаты разработки трехмерных моделей нерегулярных насадочных устройств колонных аппаратов с применением метода *DEM* (Метод Дискретного Элемента) для исследования гидродинамики потоков. Моделирование осуществлялось с применением различных размеров частиц, а также их физических свойств. Результаты исследований сравнивались с уравнением Эргуна, показывающим зависимость перепада давления при прохождении потока через слой насадки от свойств жидкости и геометрии частиц. Анализ результатов моделирования показывает высокую сопоставимость со значениями, полученными по уравнению, что позволяет использовать данный подход в качестве эффективного инструмента при детальном изучении потоков газа и жидкости в колонных аппаратах насадочного типа.

Ключевые слова: *CFD*; *DEM*; вычислительная гидродинамика; колонна; контактные устройства; моделирование; насадка.

Насадочные колонны широко применяются для процессов адсорбции, ректификации, а также для очистки и охлаждения газов. Колонны такого типа удовлетворительно работают только при обильном и равномерном орошении насадки жидкостью¹.

В настоящее время методы технологического расчета процессов ректификации с применением аппаратов насадочного типа базируются

The results of the development of three-dimensional models of irregular packing devices of column apparatuses using the *DEM* (Discrete Element Method) method for studying flow hydrodynamics are presented. Modeling was carried out using various shapes and sizes of particles, as well as their physical properties. The research results were compared with the Ergun equation, showing the dependence of the pressure drop during the passage of the flow through the nozzle layer on the properties of the liquid and particle geometry. Analysis of the simulation results shows high comparability with the values obtained by the equation, which allows us to use this approach as an effective tool for the detailed study of gas and liquid flows in packed column apparatus.

Key words: *CFD*; column; computational fluid dynamics; contact devices; *DEM*; modeling; nozzle.

ся на уравнениях рабочей линии, теоретической ступени контакта и на понятии высоты единицы переноса².

Все эти методы в той или иной мере теоретически обоснованы, но являются недостаточно точными и не могут полностью описать гидродинамику насадочных устройств. Поэтому для глубокого изучения данного процесса движения жидкости и газа через слой твердых тел различной конфигурации (насадку) целесообразно применять моделирование на основе вы-

Дата поступления 19.03.20

числительной гидродинамики. Это позволяет значительно интенсифицировать процесс и расширить область его применения. Возможность описать в модели сразу несколько физических явлений крайне полезна при анализе гидродинамических процессов ³.

DEM позволяет получить рабочую виртуальную модель для исследований, не прибегая к созданию сложной физической модели для испытаний.

DEM — это семейство численных методов, предназначенных для расчета движения большого количества частиц, таких как молекулы, песчинки, гравий, галька и прочих гранулированных сред ⁴.

В последнее время был осуществлен ряд исследований гидродинамики насадочных контактных устройств с использованием компьютерного моделирования. Так, Т. Эппингер, К. Сэйдлер и М. Крауме исследовали гидродинамику насадочных устройств сферического типа с помощью компьютерной модели, в которой частицы насадки уплотняются вблизи точек их соприкосновения со стенками и с другими частицами ⁵. Оокавара, Куроки, Стрит и Огава исследовали зависимость между распределением частиц по слоям насадки и распределением потока пара, в их моделях частицы насадки в точках соприкосновения друг с другом имели цилиндрические выпуклости ⁶. Т. Тсори, Н. Бен-Якоб, Т. Брос и А. Леви разработали модель системы частиц с помощью *DEM* и исследовали явление теплопередачи между частицами и жидкостью ⁷. В другой работе они также разработали модель теплопередачи, но уже в системах «частица—частица» и «частица—стенка». В работе М. Соурека и М. Айсоза представлено трехмерное моделирование течения потока жидкости в двух моделях насадочных контактных устройств, различающихся по типу используемой формы частиц насадки. Генерацию случайного распределения частиц насадки они проводили в программном обеспечении *Blender* с использованием программирования на языке *Python* ⁸.

В данной работе разработаны *DEM*-модели нерегулярных насадочных контактных устройств с помощью программы *Blender*. В качестве элементов насадок использовались сферы диаметром 40, 50 и 60 мм. Также, проводилась проверка адаптации геометрической модели для программного комплекса *Ansys Fluent* путем моделирования гидродинамики потока газа. Результаты сравнивались с эмпирическими расчетами перепада давления потока при

прохождении через слой насадки по уравнению Эргуна (1)

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{150 \cdot \mu \cdot V_0 \cdot (1-\varepsilon)^2}{d_q^2 \cdot \varepsilon} + \frac{1,75 \cdot \rho \cdot V_0^2 \cdot (1-\varepsilon)}{d_q \cdot \varepsilon^3} \quad (1)$$

где ΔP — перепад давления, Па;
 L — высота слоя насадки, м;
 d_q — диаметр частицы, м;
 ε — пористость среды, м³/м³;
 μ — динамическая вязкость газа, Па·с;
 V_0 — линейная скорость потока газа, м/с;
 ρ — плотность газа, кг/м³.

Метод дискретного элемента — это семейство методов, предназначенных для расчета движения большого количества частиц. Фундаментальным предположением метода является то, что материал состоит из отдельных, дискретных частиц, которые могут иметь различные поверхности и свойства, например:

- 1) жидкости;
- 2) сыпучие вещества в элеваторе, такие как крупа;
- 3) гранулированный материал, такой как песок;
- 4) порошки и др.

ПО *Blender* — пакет для создания 3D-графики, включающий в себя средства моделирования, анимации, рендеринга, постобработки видео и т.д. Основными его преимуществами являются:

- 1) малый размер;
- 2) бесплатный и доступный;
- 3) реализация функции динамики твердых и мягких тел и жидкостей.

Преимуществами моделирования методом дискретных элементов являются

- 1) возможность использования различной геометрии (сфера, цилиндр, кольца Рашига и т.д.) и размеров;
- 2) физика твердых и мягких тел;
- 3) использование системы частиц, модификаторов для неразрушающих эффектов;
- 4) возможность программирования на языке *Python*.

Трехмерные твердотельные модели насадочных устройств разрабатывались в программном обеспечении *Blender*. Первым этапом разработки является создание геометрии модели и задание ее физических свойств. На рис. 1 приведены основные элементы геометрии, необходимые для генерации процесса засыпания насадки.

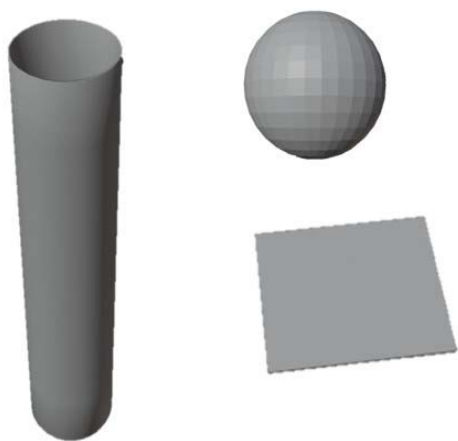


Рис. 1. Основные элементы геометрии

DEM моделирование начинается с помещения всех частиц в конкретное положение и задания величин сил, воздействующих на каждую частицу, таких как трение, отскокивание, сила гравитации, сила притяжения между частицами, сила Кулона, сила Ван-дер-Ваальса и т.д. В данном исследовании применялись во внимание только первые три. После задания сил их величины рассчитываются, исходя из начальных данных и соответствующих физических законов, складываются, чтобы найти результирующую силу, воздействующую на каждую частицу, и интегрируются, чтобы рассчитать изменение в положении и скорости каждой частицы в течение определенного временного шага из законов Ньютона, и новое положение используется для расчета сил в течение следующего шага. Цикл вычислений программы повторяется окончания моделирования. На рис. 2 показаны геометрические параметры модели до симуляции засыпания и планируемой модели в конце симуляции.

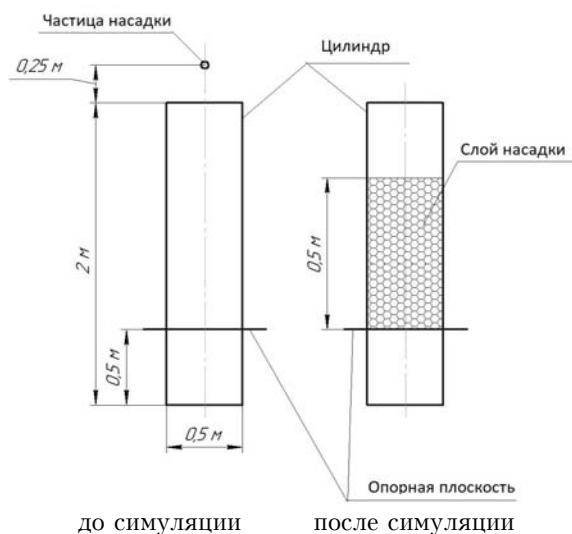


Рис. 2. Геометрические размеры трехмерной модели

На рис. 3 представлен пример задания физических свойств для сферы.

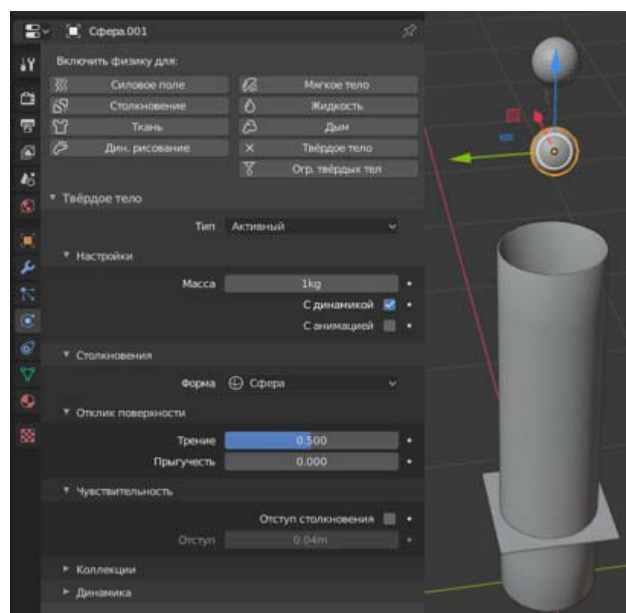


Рис. 3. Задание физических свойств для сферы

Симуляция заполнения цилиндра частицами производится в результате действия сил гравитации на них. В результате генерируются рабочие виртуальные модели нерегулярных насадочных устройств (рис. 4).

В современных программных обеспечениях вычислительной гидродинамики имеется возможность импортирования моделей. Для исследования гидродинамики исследуемых моделей насадочных устройств необходимо произвести извлечение расчетного домена в *Ansys SpaceClaim*⁹. Расчетные области моделирования представлены на рис. 5.

Созданные расчетные области импортируются в *Ansys Meshing* для покрытия расчетной сеткой. Количество элементов расчетной сетки каждой модели составляет от 1.2 до 1.5 млн. Сгенерированные модели представлены на рис. 6. Моделирование гидродинамики производится в *Ansys Fluent*.

Результаты и их обсуждение

Для гидродинамических расчетов использовалась стандартная $k-\epsilon$ модель турбулентности потока. Моделирование проводилось при следующих значениях скоростей газа:

$$V_1 = 5 \text{ м/с}, V_2 = 10 \text{ м/с}, V_3 = 15 \text{ м/с}.$$

Данный эксперимент позволил вычислить перепады скоростей и давлений потоков, которые сравнивались с уравнением Эргуна¹⁰.

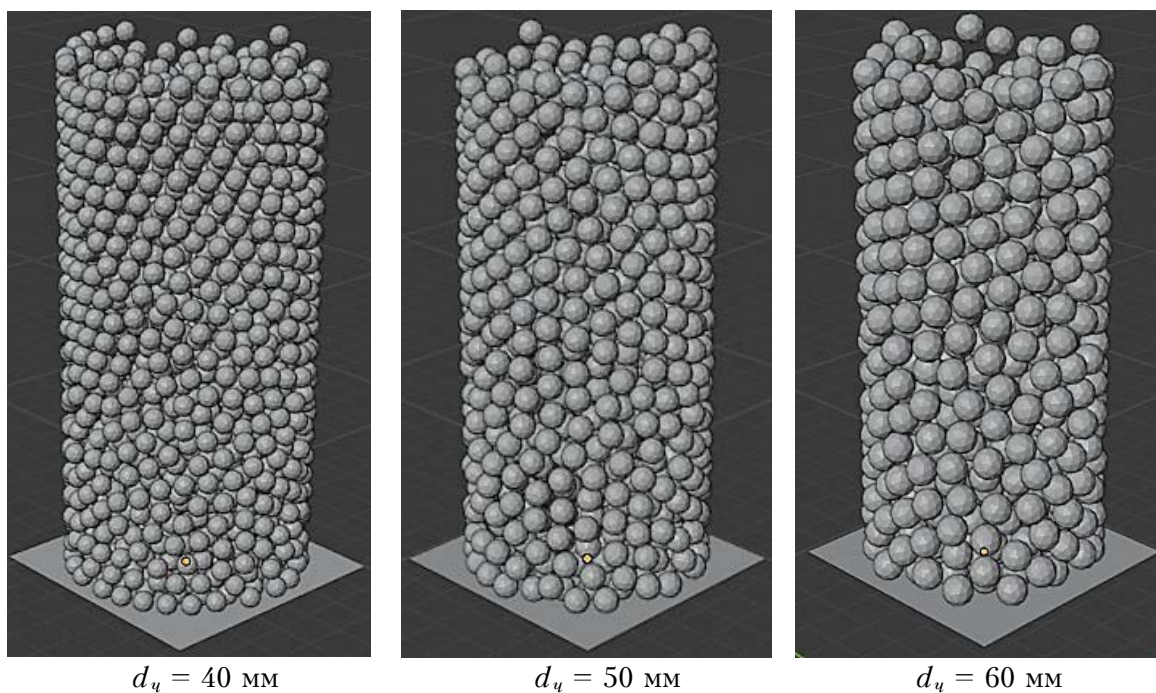


Рис. 4. Трехмерные твердотельные модели насадочных устройств

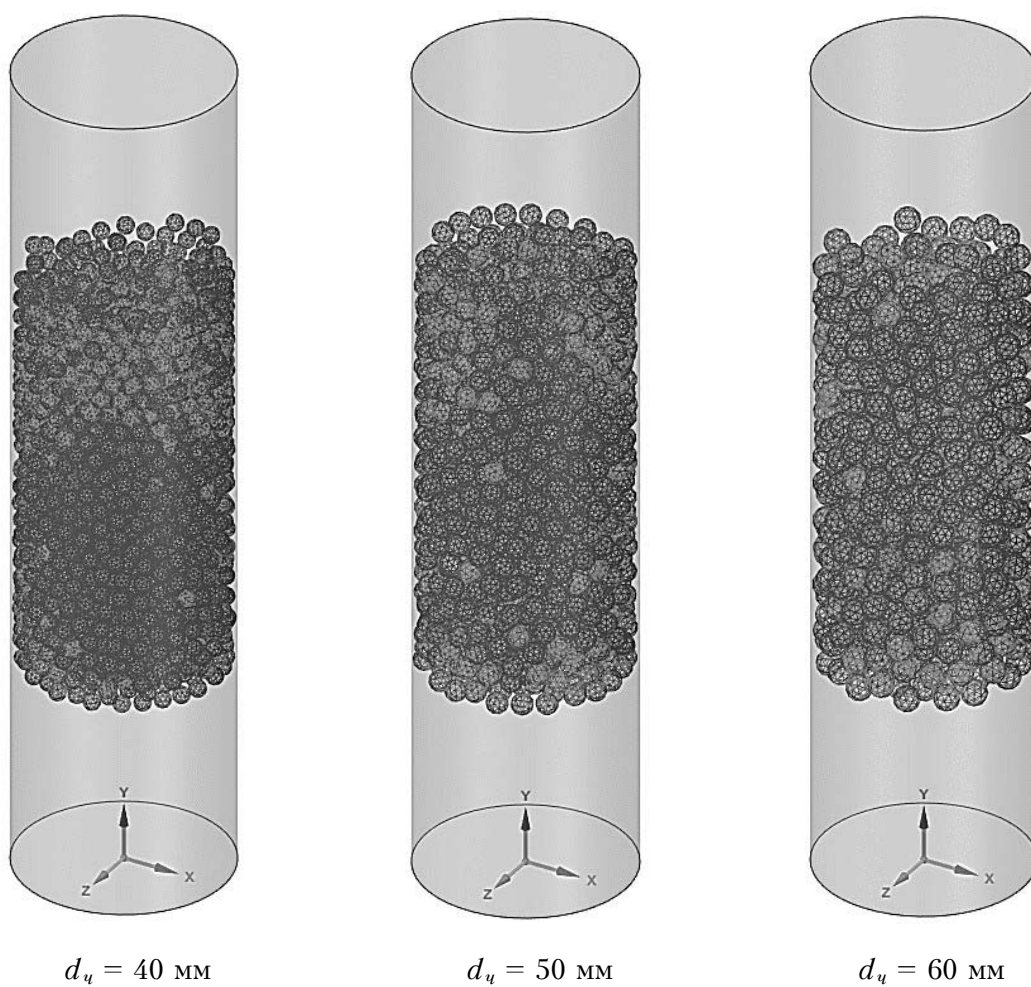


Рис. 5. Расчетные области моделирования

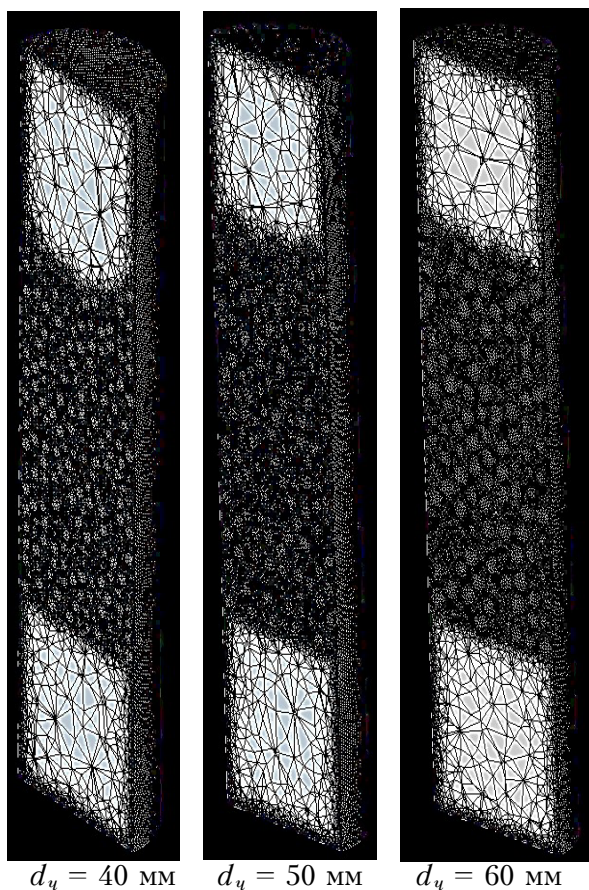


Рис. 6. Расчетные сеточные модели

На рис. 7 приведены симуляции распределений давления каждой насадки в продольном сечении исследуемой модели при линейной скорости потока на входе 5 м/с. На графиках присутствуют отрицательные значения давлений, так как за основу взято избыточное.

На рис. 8 приведено сравнение данных, полученных в результате моделирования со значениями, вычисленными с помощью уравнения Эргуна.

Полученные результаты моделирования показывают хорошую сходимость с формульными данными. Разница между ними не превышает 12% и обусловлена двумя причинами:

1) применяемая трехмерная модель имеет идеальную поверхность в отличие от натуральных тел, на которых и основано уравнение Эргуна и которые имеют шероховатости, неровности поверхности, внутренние поры и пр.;

2) исследования проводятся при высоких скоростях потока, не применяемых в промышленности, в которых и наблюдаются самые высокие расхождения ¹¹.

Данный подход в изучении протекания процессов с использованием насадочных контактных устройств позволяет более детально исследовать гидродинамику потоков, т.к. имеется возможность не только изучать их свойства, но и оценивать визуальную составляющую, например, распределение жидкости по слою насадки.

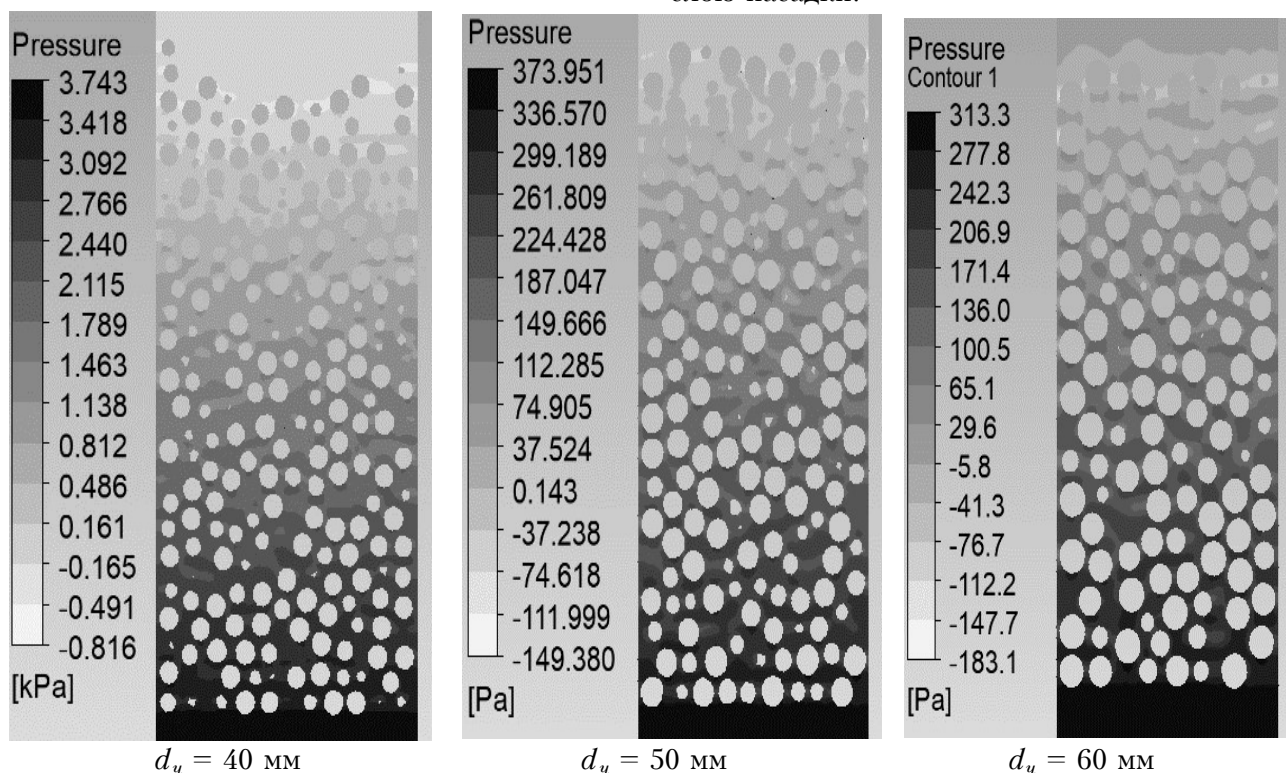
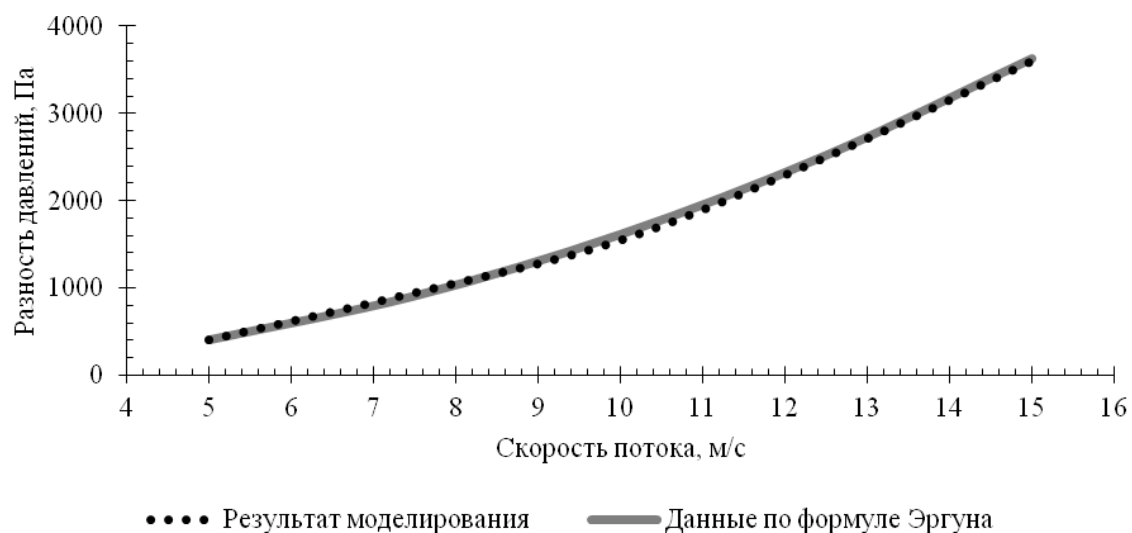
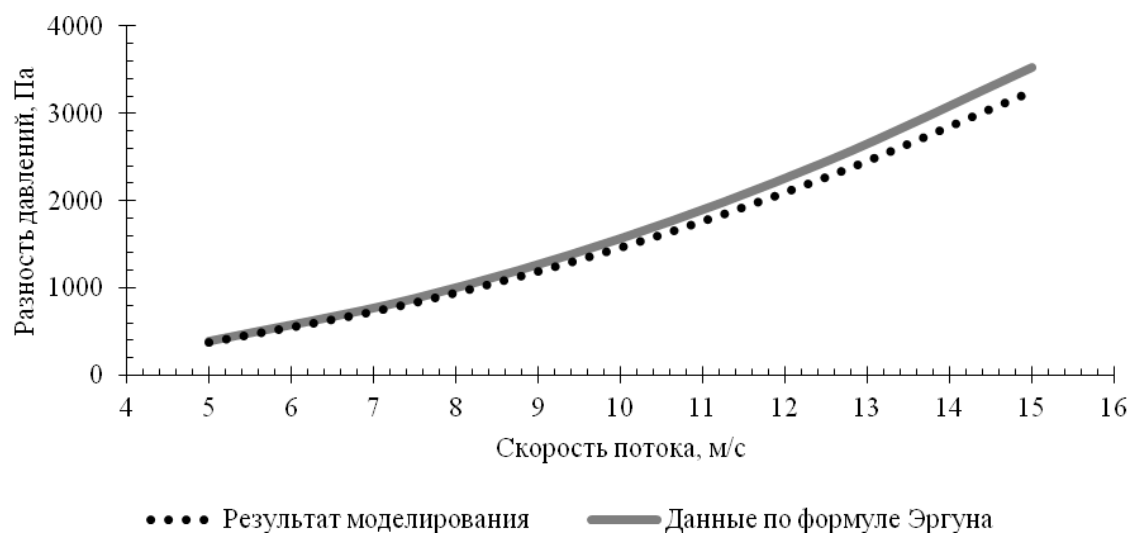


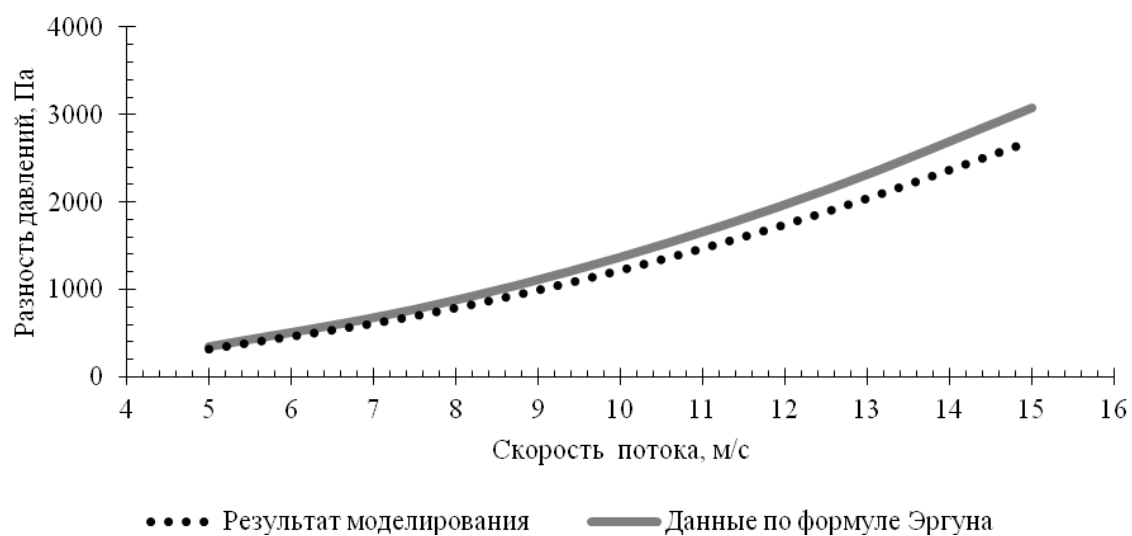
Рис. 7. Симуляции распределения давлений потока газа при скорости потока 5 м/с



$d_q = 40 \text{ мм}$



$d_q = 50 \text{ мм}$



$d_q = 60 \text{ мм}$

Рис. 8. Сравнительные графики зависимостей перепадов давления от скоростей потоков, полученных моделированием с данными, вычисленными по уравнению Эргуна

Литература

1. Александров И.А. Перегонка и ректификация в нефтепереработке.— М.: Химия, 1981.— 352 с.
2. Комиссаров Ю.А., Гордеев Л.С., Вент Д.П. Процессы и аппараты химической технологии.— М.: Юрайт, 2018.— 219 с.
3. Anderson J.D. Computational Fluid Dynamics. The basics with applications.— McGraw-Hill: Science/Engineering/Math, 1995.— 547 p.
4. Арсентьев В.А., Блехман И.И., Блехман Л.И., Вайсберг Л.А., Иванов К.С., Кривцов А.М. Методы динамики частиц и дискретных элементов как инструмент исследования и оптимизации процессов переработки природных и техногенных материалов // Обогащение руд.— 2010.— №1.— С.30-35.
5. Eppinger T., Seidler K., Kraume M. *DEM-CFD* simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios // Chemical Engineering Journal.— 2011.— №166.— Pp.324-331.
6. Ookawara S., Kuroki M., Street D., Ogawaa K. High-fidelity *DEM-CFD* modeling of packed bed reactors for process intensification // Proceedings of European Congress of Chemical Engineering.— 2007.— №6.— Pp.16-20.
7. Tsory T., Ben-Jacob N., Brosh T., Levy A. Thermal *DEM-CFD* modeling and simulation of heat transfer through packed bed // Powder Technology.— 2013.— №244.— Pp.52-60.
8. Sourekl M., Isozl M. *DEM-CFD* study of flow in a random packed bed // Topical problems of fluid mechanic.— 2018.— №36.— Pp.265-272.
9. Richard H. Gallagher. Finite element analysis/ Fundamentals.— Englewood Cliffs: Prentice-Hall, Inc., 1975.— 428 p.
10. Берд Р., Стюарт В., Лайтфул Е. Явления переноса.— М.: Химия, 1974.— 688 с.
11. Флореа О., Смигельский О. Расчеты по процессам и аппаратам химической технологии.— М.: Химия, 1971.— 448 с.

References

1. Aleksandrov I.A. *Peregonka i rektifikatsiya v neftepererabotke* [Distillation and rectification in oil refining]. Moscow, Khimiya Publ., 1981, 352 p.
2. Komissarov Yu.A., Gordeev L.S., Vent D.P. *Protsessy i apparaty khimicheskoi tekhnologii* [Processes and devices of chemical technology]. Moscow, Yurayt, 2018, 219 p.
3. Anderson J.D. Computational Fluid Dynamics. The basics with applications. McGraw-Hill: Science/Engineering/Math, 1995, 547 p.
4. Arsent'ev V.A., Blekhman I.I., Blekhman L.I., Vaisberg L.A., Ivanov K.S., Krivtsov A.M. *Metody dinamiki chastits i diskretnykh elementov kak instrument issledovaniia i optimizatsii protsessov pererabotki prirodnkh i tekhnogennykh materialov* [Methods of dynamics of particles and discrete elements as a tool for research and optimization of processes of processing of natural and man-made materials] *Obogashchenie rud* [Ore dressing], 2010, no.1, pp.30-35.
5. Eppinger T., Seidler K., Kraume M. [*DEM-CFD* simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios]. *Chemical Engineering Journal*, 2011, no.166, pp.324-331.
6. Ookawara S., Kuroki M., Street D., Ogawaa K. [High-fidelity *DEM-CFD* modeling of packed bed reactors for process intensification]. *Proceedings of European Congress of Chemical Engineering*, 2007, no.6, pp.16-20.
7. Tsory T., Ben-Jacob N., Brosh T., Levy A. [Thermal *DEM-CFD* modeling and simulation of heat transfer through packed bed]. *Powder Technology*, 2013, no.244, pp.52-60.
8. Sourekl M., Isozl M. [*DEM-CFD* study of flow in a random packed bed]. *Topical problems of fluid mechanic*, 2018, no.36, pp.265-272.
9. Richard H. Gallagher. [Finite element analysis. Fundamentals]. Englewood Cliffs, Prentice-Hall, Inc., 1975, 428 p.
10. Berd R., St'iuart V., Laitful E. *Yavleniya perenosa* [Transfer phenomena]. Moscow, Khimiya Publ., 1974, 688 p.
11. Florea O., Smigel'skii O. *Raschety po protsessam i apparatam khimicheskoi tekhnologii* [Calculations for processes and devices of chemical technology]. Khimiya Publ., 1971, 448 p.