

DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS

GYURIK LÍVIA RÉKA

Veszprém
2020

Pannon Egyetem
Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet

DOI:10.18136/PE.2020.769

**Kétfázisú áramlásokat leíró modellek és szimulációk alkalmazása
és fejlesztése**

DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS

Gyurik Livia Réka

Témavezetők
Dr. Egedy Attila, egyetemi docens
Dr. Ulbert Zsolt, egyetemi docens

Vegyészmérnöki- és Anyagtudományok Doktori Iskola
Pannon Egyetem
2020

Kétfázisú áramlásokat leíró modellek és szimulációk alkalmazása és fejlesztése

Az értekezés doktori (PhD) fokozat elnyerése érdekében készült a Pannon Egyetem Vegyészmérnöki és Anyagtudományok Doktori Iskolája keretében

bio-, környezet- és vegyészmérnöki tudományok tudományágban

Írta: Gyurik Livia Réka

Témavezetők: Dr. Egedy Attila, Dr. Ulbert Zsolt

Elfogadásra javaslom (igen / nem)

.....
(témavezetők)

Az értekezést bírálóként elfogadásra javaslom:

Bíráló neve: igen /nem

.....
(bíráló)

Bíráló neve: igen /nem

.....
(bíráló)

A jelölt az értekezés nyilvános vitáján%-ot ért el.

Veszprém,

.....
(a Bíráló Bizottság elnöke)

A doktori (PhD) oklevél minősítése.....

Veszprém,

.....
(az EDHT elnöke)

Kivonat

Kétfázisú áramlásokat leíró modellek és szimulációk alkalmazása és fejlesztése

A doktori dolgozatban a kétfázisú rendszerek modellezési és szimulációs kihívásaival foglalkozom, és az azon belül végzett tudományos eredményeimet mutatom be. Gáz-szilárd és folyadék-szilárd rendszerek a vegyipar számos műveletében előfordulnak, például keverésnél, szétválasztásnál vagy fluidizáció esetében. A modellezési lehetőségeknek széles választéka áll a kutatók rendelkezésére, melyeket megfelelően kiválasztva és alkalmazva egy-egy vegyipari technológiafejlesztési probléma megoldásában hatékonyan felhasználhatunk. A dolgozatban az elméleti bevezetőt követően a kísérletekhez és a szimulációs számításokhoz szükséges módszereket és eszközöket ismertetem, majd gyakorlati részként az újonnan kialakított, kétfázisú rendszerek fáziskölcsönhatásával is számoló modelleket mutatom be esettanulmányokon keresztül. A biomassza elgázosító reaktor hidrodinamikáját vizsgáló, többfuratos jetkeverő keverőteljesítményét jellemző, laboratóriumi fluidizációs berendezést modellező, adszorpciós, valamint szedimentációs folyamatot részletesen leíró modellek reprezentatív mintáját adják azon esetek kezelésének, amelyekhez jól használható implementációkat fejlesztettem. A direkt numerikus szimulációk, ezen belül az immersed boundary módszer volt a leggyakrabban alkalmazott módszer, amelyet az az utóbbi három példa esetén használtam. Az immersed boundary módszeren alapuló szimulációkban a fő tudományos eredményt a konkrét vegyipari művelet-elemekre alkalmazhatóság körülményeinek megteremtése jelenti. Ezekben a példákban olyan szimulátorokat hoztam létre, amelyek alkalmasak a bemutatott gáz-szilárd és folyadék-szilárd kétfázisú áramlást tartalmazó rendszerekhez hasonló más rendszerek modellalapú tanulmányozására is.

Kulcsszavak: kétfázisú modellezés, fáziskölcsönhatás, hidrodinamika, numerikus áramlástan, folyamatintenzifikálás

Abstract

Application and developement of two-phase models and simulators

In the doctoral dissertation I approach the modeling and simulation challenges of two-phase systems and present my scientific results. Gas-solid and liquid-solid systems are a part of many operations in the chemical industry, such as mixing, separation or fluidization. A wide range of modeling options is available to the researchers, which can be selected and applied to the solution of a chemical technology development problem.

My dissertation will begin with the theoretical introduction where I describe the methods and tools required for experiments and simulation calculations. Next, I will continue with the practical side where I present the newly developed models that also calculates the phase interaction of two-phase systems through case studies. I provide a representative sample of models for cases where I developed reliable tools (Including, but not limited to: studying the hydrodynamics of a biomass gasification reactor, characterizing the mixing performance of a multi-bore jet mixer, modeling laboratory-scaled fluidization equipment and describing the adsorption and sedimentation process in detail). Along with direct numerical simulations, my most commonly used tool was the immersed boundry method. My last three examples utilize this method resulting in the creation of conditions for the applicability to other cases. In the examples provided, I have created simulators that are also suitable for model-based studies of other systems similar to the presented gas-solid and liquid-solid two-phase flow systems.

Keywords: two-phase modeling, phase interaction, hydrodynamics, computational fluid dynamics, process intensification

Auszug

Anwendung und Entwicklung von Zweiphasenmodellen und Simulatoren

In der Dissertation beschäftige ich mich mit den Modellierungs- und Simulationsherausforderungen von Zweiphasensystemen und ich präsentiere meine wissenschaftlichen Ergebnisse. Gas-Feststoff- und Flüssigkeit-Feststoff-Systeme treten in vielen Bereichen der Chemieindustrie auf, zum Beispiel beim Mischen, bei der Zertrennung oder Fluidisieren. Dem Forscher steht eine breite Palette von Modellierungsoptionen zur Verfügung, die nach der richtigen Auswahl und Anwendung zur Lösung eines Entwicklungsproblems der chemischen Technologie eingesetzt werden können. In der Dissertation beschreibe ich nach der theoretischen Einführung die Methoden und Werkzeuge, die für Experimente und Simulationsberechnungen erforderlich sind, dann stelle ich als praktischen Teil die Modelle vor, die auch die Phasenwechselwirkung von neu entwickelten Zweiphasensystemen anhand aufgrund der Fallstudien. Die Direkten numerischen Simulationen, innerhalb die Immersed Boundary-Methode waren meine am häufigsten verwendete Methode, die ich bei den letzten drei Beispiele verwendet habe. In diesen Beispielen habe ich solche Simulatoren erstellt, die auch für modellbasierte Studien anderer Systeme geeignet sind, die zu den vorgestellten Zweiphasenströmungssystemen Gas-Feststoff und Flüssigkeit-Feststoff Systeme (also den Verschränkung) ähnlich sind.

Schlüsselwörter: Zweiphasenmodellierung, Phasenwechselwirkung, Hydrodynamik, Numerische Fluidodynamik, Prozessintensivierung

Tartalomjegyzék

Kivonat.....	5
Abstract	6
Auszug	7
Tartalomjegyzék.....	8
1. Bevezetés.....	11
Rövidítések jegyzéke.....	13
Jelölésjegyzék.....	15
2. Irodalmi áttekintés.....	16
2.1. Két-folyadék módszer.....	17
2.2. CFD-Diszkrét elem módszer.....	19
2.3. Direkt numerikus szimulációs módszerek	22
2.3.1. <i>Body-fitted módszerek</i>	23
2.3.2. <i>Immersed Boundary módszer</i>	24
2.4. A modellegyenletek diszkrétizálásának és numerikus megoldásának módszerei	29
2.4.1. <i>A véges differenciák módszere</i>	29
2.4.2. <i>A véges térfogatok módszere</i>	31
2.4.3. <i>Euler egyenletek összenyomható közegekre</i>	33
2.4.4. <i>MacCormack módszer</i>	34
2.4.5. <i>Navier-Stokes egyenletek összenyomhatatlan közegekre</i>	37
2.4.6. <i>A nyomáskorrekciós módszer</i>	38
3. Módszerek és eszközök	41
3.1. COMSOL Multiphysics szoftver	41
3.1.1. <i>Level Set módszer</i>	43
3.1.2. <i>Szemcsekövetés (Particle Tracing)</i>	44
3.1.3. <i>Turbulenciamodellek</i>	45
3.2. Hálófüggetlenségi vizsgálat	47
3.3. Tartózkodási idő analízis	48
3.4. Cellás modellezés.....	49
3.5. A numerikus módszerek verifikálása.....	52
3.6. Biomassza elgázosító reaktor.....	55

3.7. Többfuratos jetkeverő	55
3.8. Fluidizációs cella	56
3.9. Szedimentációs oszlop	58
4. Esettanulmányok és eredmények	59
4.1. Biomassza elgázosító reaktor hidrodinamikai modellezése	60
4.1.1. <i>Módszerek és eszközök</i>	62
4.1.2. <i>Eredmények és értékelés</i>	64
4.1.3. <i>Összefoglalás</i>	73
4.2. Többfuratos jetkeverő keverőtéljesítményének jellemzése szemcsekövetésen alapuló kevertségi mérték alapján	75
4.2.1. <i>Irodalmi bevezetés</i>	75
4.2.2. <i>Modell-leírás és módszertan</i>	79
4.2.3. <i>Hálófüggetlenségi vizsgálat</i>	83
4.2.4. <i>Kísérleti berendezés és tartózkodási idő analízis</i>	84
4.2.5. <i>Eredmények és értékelésük</i>	88
4.2.6. <i>Összefoglalás</i>	93
4.3. Laboratóriumi méretű fluidizációs berendezés CFD modellezése direkt numerikus módszerrel	95
4.3.1. <i>Modellegyenletek</i>	96
4.3.2. <i>Fáziskölcsönhatás</i>	98
4.3.3. <i>Eredmények</i>	99
4.3.4. <i>Összefoglalás</i>	101
4.4. Adszorpciós gáztisztító rendszer modellezése	103
4.4.1. <i>Módszerek és eszközök</i>	104
4.4.2. <i>Eredmények és értékelés</i>	108
4.4.3. <i>Összefoglalás</i>	109
4.5. Szilárd szemcse ülepedési trajektóriájának meghatározása newtoni folyadékokban	110
4.5.1. <i>Modellezés Level-Set módszerrel</i>	113
4.5.2. <i>Modellezés szemcsekövetéssel</i>	117
4.5.3. <i>Modellezés Immersed Boundary módszerrel</i>	118
4.5.4. <i>Összefoglalás</i>	120

5. Összefoglalás.....	121
Köszönetnyilvánítás	123
Új tudományos eredmények (tézisek).....	124
New scientific results (theses).....	126
Publikációk.....	128
Irodalomjegyzék.....	130

1. Bevezetés

Kétfázisú áramlás számos vegyipari folyamatban előfordul. Ha a gáz-szilárd kétfázisú áramlásokat tekintjük, akkor a szemcsetechnológiai műveletek (pl. fluidizáció, pneumatikus szállítás) mind olyan folyamatok, amelyek megértését segítheti a modellezés és szimuláció. A megismerés útja lehet méréseken keresztüli vagy szimulációs vizsgálatokból nyert információ, melyekből az utóbbinak nagy előnye a rugalmasság. A részletes szimulációs vizsgálatokon keresztüli jobb megértés számos területen hozhat gazdasági, és közvetve vagy közvetlenül környezetvédelmi hasznot. A kétfázisú rendszerekben meglehetősen nehéz az áramlás megzavarása nélkül végezni olyan méréseket, amelyek részletes információval látnának el a rendszer működéséről. Modellalapú megismeréshez vezet az is, ha empirikus modellekkel dolgozunk. Azonban a korunkra jellemző ugrásszerű számítástechnikai fejlődés lehetővé teszi, hogy belátható időn belül eredményt kapjunk a részletes, fázis szintű modellek megoldására is, mivel numerikus megoldásukra hatékony módszerek, a számítási műveletek elvégzéséhez pedig nagy teljesítményű számítógépek állnak rendelkezésre. A numerikus áramlástan (Computational Fluid Dynamics, CFD) módszereit alkalmaztam a modellfejlesztésben és a szimulációs vizsgálatokban. Egyes esetekben olyan programcsomagot használtam, ahol a megoldómódszereket ki lehet választani az adott modell és probléma megoldására, más esetekben a modellegyenletek diszkretizálásának és megoldásának lépéseit saját fejlesztésű programmal oldottam meg.

Dolgozatomban először az aktuális szakirodalmat ismertetem a fluid-szilárd kétfázisú rendszerek modellezési módszereire fókuszálva, a dolgozat második fele pedig esettanulmányokon keresztül mutatja be a korábban említett módszerek alkalmazását különböző problémákra, és az azokkal elért eredményeket. Egy többfuratos multijet keverő példáján szemcsekövetési vizsgálaton alapuló homogenitásmérték számítását mutatom be, valamint egy biomassa elgázosító reaktor példáján CFD és cellás modellezés alkalmazásával nyert következtetéseimet ismertetem. Ehhez a két példához egyfázisú modelleket alkalmaztam, a szilárd fázis a modellben közvetlenül nem jelenik meg. Szilárd szemcse folyadékban való ülepedését vizsgáló esettanulmányomban a folyadék-

szilárd rendszer leírására az Immersed Boundary módszert használtam, és a vizsgált eset a közeg összenyomhatatlanságában (ebből fakadóan a megoldandó egyenletekben és megoldómódszerekben) tér el a gáz-szilárd rendszereket vizsgáló további két példától. Gáz-szilárd fluidizáció modellezésére fejlesztettem részletes, direkt numerikus módszeren alapuló szimulátort, és ennek kiterjesztéseként egy gáz- és szilárd fázis közötti komponensátadással bővített modellt fejlesztettem adszorpciós gáztisztító oszlop működésének vizsgálatára. Az új tudományos eredményeket a dolgozat végén tézispontokba szedve ismertetem.

Rövidítések jegyzéke

Rövidítés	Angol kifejezés	Magyar kifejezés
av	average	átlag
CFD	Computational Fluid Dynamics	numerikus áramlástan
CFL	Courant-Friedrich-Lewy	
CM	compartment modeling	cellás modellezés
DEM	Discrete Element Method	diszkrét elem módszer
DNS	Direct Numerical Simulations	közvetlen számításos módszer vagy direkt numerikus szimulációk
FCC	fluid catalytic cracking	fluidágyas katalitikus krakkolás (olyan katalitikus krakkolás, amelyben a katalizátor fluidizált állapotban van)
FDM	Finite Difference Method	véges differenciák módszere
FEM	Finite Element Method	végeselem módszer
fps	frame per second	képkocka másodpercenként
FSI	fluid-structure interaction	fluid-szilárd kölcsönhatás
FVM	Finite Volume Method	véges térfogatok módszere
IBM	Immersed Boundary Method	
KTGF	kinetic theory of granular flow	szemcsés közegek áramlásának kinetikai elmélete
PEPT	positron emission particle tracking	szemcsékövetés pozitron kibocsátásos technikával
PIMPLE		SIMPLE és PISO keveréke
PISO	Pressure-Implicit with Splitting of Operators	
PIV	particle image velocimetry	optikai sebességmérés
PSO	particle swarm optimization	

ROI	region of interest	kiemelt képtartomány
RTD	residence time distribution	tartózkodási idő eloszlás
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations	a legismertebb nyomáskorrekciós módszer neve
TDMA	Tridiagonal Matrix Algorithm	tridiagonális mátrix algoritmus
TFM	Two-Fluid Modell	két-folyadék elméleten alapuló modell
TKE		tökéletesen kevert egység
TVD	Total Variation Diminishing	numerikus hibát kiküszöbölő módszer neve
VOC	Volatile Organic Components	illékony szerves anyagok

Jelölésjegyzék

u	a sebesség x irányú komponense
v	a sebesség y irányú komponense
w	a sebesség z irányú komponense
t	idő
p_f	a fluid fázis nyomása
p_s	a szilárd fázis nyomása
$\bar{\tau}_f$	a fluid fázis viszkozus feszültségtenzora
$\bar{\tau}_s$	a szilárd fázis viszkozus feszültségtenzora
β	a közegellenállási együttható
$\vec{g}$	pedig a gravitációs gyorsulásvektor
μ	dinamikai viszkozitás
ρ	sűrűség
L	karakterisztikus hossz
e	belső energia
E	belső- és mozgási energia összege
γ	hőkapacitási hányados
Re	Reynolds szám
f	body force
$\mathbf{x}$	az euleri pontok koordinátái
$\mathbf{X}$	a lagrange-i pontok koordinátái
h	az euleri rácspontok közötti távolság (rácsszélesség)
Δs	a lagrange-i rácspontok közötti távolság (rácsszélesség)
δ	interpolációs függvény
g	gravitációs gyorsulás
$\mathbf{U}_b$	a sebességvektor a lagrange-i pontban
RHS	összefoglaló jelölése egy egyenlet jobboldolára rendezett tagjainak
$\bar{\tau}$	átlagos tartózkodási idő
C	koncentráció
F	térfogatáram
V	térfogat

2. Irodalmi áttekintés

Ebben a fejezetben a kétfázisú áramlások modellezésének elméleti megközelítési módjait mutatom be, melyek az általam is alkalmazott vagy továbbfejlesztett módszerek alapjai. A kétfázisú rendszerek áramlási modellezésében háromféle fő megközelítési irány terjedt el, melyek a fluid és a szilárd fázist a 2.1. táblázatban található módon kezelik.

2.1. táblázat. Alap modellezési megközelítések kétfázisú áramlások számítására.

Modellezési módszer	Fluid fázis	Szilárd fázis
Két-folyadék módszer (Euler-Euler)	térfogatátlagolt áramlási egyenletek	térfogatátlagolt áramlási egyenletek
CFD-Diszkrét elem módszer (Euler-Lagrangian)	térfogatátlagolt áramlási egyenletek	egyedi részecskékre felírt mozgásegyenlet
Direkt numerikus szimuláció (Euler-Lagrangian)	áramlási egyenletek	egyedi részecskékre felírt mozgásegyenlet

Az áramlási egyenletek numerikus megoldásában azok a módszerek, amelyek térfogatátlagolt áramlási egyenleteket alkalmaznak, számítási hálóként a diszpergált fáziselemek méreténél egy vagy több nagyságrenddel nagyobb számítási cellaméretet használnak. A két-folyadék módszer a szilárd fázist is egy folytonos fázisnak tekinti és a két fázis sebességének és térfogati hányadának időbeli és helybeli változásának meghatározására alkalmas. A CFD-Diszkrét elem módszer alkalmazása során a szilárd fázist alkotó szemcséket különállóan kezeljük, ezért az alkalmazott számítási cellákban ki tudjuk számítani az adott időpillanatban érvényes átlagos térfogati hányadukat. Így ez a módszer amellet, hogy számítja a részecskék mozgását, a gázfázis sebességének meghatározására a térfogatátlagolt áramlási egyenleteket használja, amely során felhasználjuk a szilárd részecskék pozíciója és mérete alapján számított, a gázfázisra érvényes átlagos ürestérfogati hányad értékeit az egyes számítási cellákban. A térfogatátlagolt áramlási egyenletek esetében az egyenletekben a gázfázisra érvényes ürestérfogati hányad pontváltozóként jelenik meg, amelynek értéke a numerikus megoldás során az előbbieken említett átlagos ürestérfogati hányadként adható meg. A számítási cellákban érvényes átlagos szilárd térfogati

hányad és egyben a gázfázis ürestérfogati hányadának meghatározása megköveteli, hogy a számítási cella mérete a szilárd részecskék méreténél legalább egy nagyságrenddel nagyobb legyen. A harmadik modellezési módszer, a direkt numerikus szimuláció, a legrészletesebb eredményt nyújtó módszer, amely az egyedi szilárd részecskék sebességének számítására, valamint a fluid fázis részecskék közötti részletes áramlásának meghatározására alkalmas a normál áramlási egyenletek felhasználásával. Ezen módszer esetén az áramlási térben elhelyezkedő részecskék falként, peremként jelennek meg. Ennél fogva a direkt numerikus szimuláció esetében a szilárd részecskéknél nagyságrendileg kisebb méretű cellákat használó számítási hálót alkalmazunk.

A két-folyadék módszer nem nyújt részletes eredményt a szilárd fázist tekintve, a második és harmadik módszer a részecske mozgását tekintve részletes eredményt ad, a harmadik módszer pedig a gázfázis áramlását tekintve is részletes eredményt nyújt, számítva a részecskék közötti részletes áramlási mezőt. Értelemszerűen a módszerek alapján készített szimuláció számítási igénye az egyre részletesebb eredményt nyújtó módszerek esetében egyre nagyobb. A következő alfejezetekben a fenti három modellezési megközelítést mutatom be részletesebben. A modellegyenletek numerikus megoldásához diszkrétizálni kell azokat mind térben, mind időben. Számos numerikus módszer létezik a különféle osztályba sorolt parciális differenciálegyenletek megoldására, amelyek közül a fejezet negyedik alfejezetében bemutatom az általam alkalmazott numerikus módszereket.

2.1. Két-folyadék módszer

A két-folyadék módszer (Two-Fluid Method, TFM), ahogy a neve is mutatja, fluidumnak, folytonos fázisnak tekinti mindkét áramló fázist. Az elvet, hogy a szilárd részecskék áramlását is az ismert áramlási egyenletekkel (Navier-Stokes egyenletek) írjuk le, először Anderson és Jackson mutatta be 1967-ben egy fluidágy modellezésének példáján keresztül [1]. Ők vezették be a térfogatátlagolt áramlási egyenleteket, amely a számítási cellán belül átlagos térfogathányadhoz rendelt változókat használnak. Az ebben a módszerben alkalmazott számítási cella mérete a részecskék átlagos méreténél egy vagy több nagyságrenddel nagyobb. A

módszer kezdetben nem számolt a fázisok viszkozitásával. Később a két-folyadék módszert a Chapman és Cowling által bevezetett szemcsés közegek áramlásának kinetikai elméletével (kinetic theory of granular flow, KTGF) kapcsolták össze [2], és így kerültek az egyenletekbe a fáziskölcsönhatást leíró tagok. Ding és Gidaspow 1990-ben már ezt a kiegészített modellt alkalmazta fluidizáció modellezésére [3], majd ezt követően az 1990-es években számos publikáció jelent meg, amelyekben ezt a modellt alkalmazták. Boemer és Renz [4] csakúgy, mint Banaei és munkatársai [5] és még sokan mások az alábbi 2.1-2.2. egyenletekkel megadott modellt alkalmazták. A 2.1-2.2. folytonossági egyenletek a fluid- és a szilárd fázis tömegmegmaradását fejezik ki.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_f \rho_f) + \nabla \cdot (\varepsilon_f \rho_f \vec{u}_f) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) = 0 \quad (2.2)$$

ahol t az idő, ε_f , ρ_f és $\vec{u}_f$ a fluid fázis, ε_s , ρ_s és $\vec{u}_s$ pedig a szilárd fázis térfogati hányada, sűrűsége és sebességvektora. A térfogati hányadokra teljesülnie kell az $\varepsilon_f + \varepsilon_s = 1$ összefüggésnek.

Mindkét momentumegyenlet tartalmazza a két fázis kölcsönhatását leíró tagot, amely a két fázis sebesség-különbségének a függvénye (2.3. és 2.4. egyenletek).

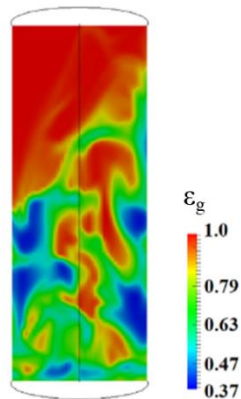
$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_f \rho_f \vec{u}_f) + \nabla \cdot (\varepsilon_f \rho_f \vec{u}_f \vec{u}_f) = -\varepsilon_f \nabla p_f - \nabla \cdot (\varepsilon_f \bar{\tau}_f) - \beta(\vec{u}_f - \vec{u}_s) + \varepsilon_f \rho_f \vec{g} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\varepsilon_s \nabla p_s - \nabla \cdot (\varepsilon_s \bar{\tau}_s) + \beta(\vec{u}_f - \vec{u}_s) + \varepsilon_s \rho_s \vec{g} \quad (2.4)$$

ahol p_f és $\bar{\tau}_f$ a fluid fázis, p_s és $\bar{\tau}_s$ pedig a szilárd fázis nyomása és a viszkózus feszültségtenzora, β a közegellenállási együttható, $\vec{g}$ pedig a gravitációs gyorsulásvektor.

Az egyenletek megoldásával minden számítási cellában megkaphatjuk az egyes fázisok által elfoglalt térfogati hányadot, valamint a fázisok sebességmezőjét. A TFM-en alapuló szimulációk eredményét úgy vizualizálják, hogy a gáz- vagy szilárd fázis térfogathányadának térbeli vagy síkbeli értékeit egy színskála alapján ábrázolják. A 2.1. ábrán például a gázfázis térfogati hányadához

rendelt színskála alapján vizualizálták egy fluidágy működésének szimulációs eredményeit.



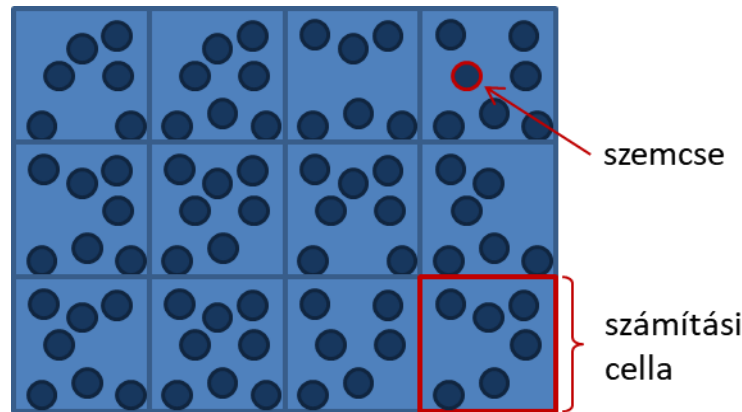
2.1. ábra. Fluidizáció szimulációja TFM modellezési megközelítést alkalmazva [5].

A TFM módszer alkalmazására számos irodalmi példa található. Banaei és munkatársai fluidizációs keverőt vizsgáltak [5], Issa és Kempf buborékoszlopos áramlást szimuláltak vízszintes csövekben [6], Boemer és Renz egy fluidágy kétdimenziós modelljét és annak szimulációs eredményeit mutatták be [4], Noetinger pedig ülepedés modellezéséhez alkalmazta a két-folyadék módszert [7]. A TFM alkalmazása kétfázisú rendszerek áramlási modellezésére még napjainkban is népszerű modellezési módszer olyan esetekben, amikor nem cél a szilárd fázist alkotó részecskék mozgásának részletes meghatározása. Nagy előnye a TFM módszernek, hogy lényegesen kisebb a számítási igénye a részletesebb eredményt biztosító másik két módszerhez képest.

2.2. CFD-Diszkrét elem módszer

A CFD-Diszkrét elem módszer alkalmazása során a gázfázis tulajdonságainak számítását a térfogatátlagolt áramlási egyenletek megoldásával végezzük, a szilárd fázist alkotó szemcsék tulajdonságait pedig egyedileg számítjuk. A diszkrét elem módszer (Discrete Element Method, DEM) egyik lényeges jellemzője, hogy az egyes részecskékről részletes információt biztosít, azok pozíciójának és méretének ismeretében kiszámíthatjuk a számítási cellában elfoglalt átlagos térfogati hányadukat, amelyet a gázfázis térfogatátlagolt áramlási egyenleteiben már ismert paraméterként használhatunk fel. A térfogatátlagolt

kifejezés itt is azt jelenti, hogy az áramlási egyenletek pontváltozóként tartalmazzák az átlagos ürestérfogati hányadot. Az áramlási egyenletek numerikus megoldása során a számítási cella méretét úgy határozzuk meg, hogy a szilárd szemcsék méretétől egy vagy több nagyságrenddel nagyobb legyen (2.2. ábra).

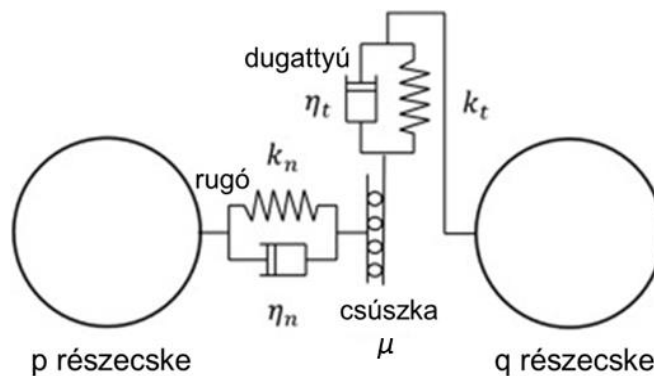


2.2. ábra: A térfogatátlagolt áramlási egyenleteket használó módszerek jellemző részecske-cellaméret aránya.

A CFD-Diszkrét elem módszert nevezik még Euler-Lagrangian, Euler-DEM vagy CFD-DEM módszernek is. Zhong és munkatársai nemrég megjelent cikkükben kiemelik a CFD-DEM alkalmazhatóságát olyan szemcsés rendszerek esetében is, ahol a szemcsék nem szabályos gömb alakúak [8]. A módszer használata az egyedileg kezelt részecskék miatt nagyon számításigényes, a jelenlegi számítási kapacitások mellett, nem párhuzamosított számítás esetén néhány százezer részecske szimulációjára alkalmas elfogadható idő alatt. A CFD-DEM módszer gyakran alkalmazott eszköz fluidizációs berendezések modellezésére. He és munkatársai CFD-DEM módszert alkalmaztak fluid-szilárd kölcsönhatás modellezésére, melyet fluidizációs berendezések példáján keresztül mutattak be [9]. Luo és munkatársai buborékoló fluidágyban létrejövő keveredést modellezték CFD-DEM módszerrel [10].

A diszkrét elem módszer alkalmazásában egyedileg számítjuk a szilárd szemcsék mozgását. A részecskék kétféle mozgással rendelkezhetnek, forgó- és haladómozgással. Az egyes részecskék forgó- és haladómozgását leíró modell alapjait Cundall dolgozta ki az 1970-es években szemcsés rendszerek részletes modellezésére [11]. A diszkrét elem módszer (Discrete Element Method, DEM) a

részecskék mozgásának leírásához rugalmas vagy rugalmatlan ütközési modelleket is alkalmazhat. A rugalmas ütközési modellek a rugalmas ütközést egyszerű mechanikai elemekkel valósítják meg. A rugalmas ütközést egy rugóval, az ütközés energiaveszteségét lengéscsillapítóval, a szemcsék közötti súrlódást pedig csúszkával modellezzük (2.3. ábra). A szemcsére hathatnak az érintőirányú (tangenciális) erők, amelyek a forgómozgást okozzák, és a normál irányú erők, amelyek a haladó mozgást okozzák. A modell paraméterei a k_n és k_t normál- és tangenciális irányra vonatkozó rugóállandók, valamint η_n és η_t normál- és tangenciális irányra vonatkozó csillapítási tényezők. A csúszka elemmel a két szemcse közötti felületi súrlódást modellezzük, paramétere a μ súrlódási együttható.



2.3. ábra. Két szemcse közötti rugalmas ütközés modellje [12].

Az ütközés és az ütközésekből származó ütközési erők számítása akkor történik, ha a két részecske középpontjainak távolsága kisebb vagy egyenlő a sugaraik összegénél. A fallal történő ütközést is szemcse-szemcse ütközésre vezetjük vissza, ekkor a fal „mögött” egy úgynevezett tükörrészecskét képzelünk el. A rugó elem által kifejtett erő mértéke azzal arányos, hogy a részecskék között elképzelt rugót mennyire nyomjuk össze, azaz a modell szerint a változatlan alak mellett mennyire fednek át. Az átfedés a két részecske sugarainak összege és a középpontjai közötti távolság különbségéből adódik. A diszkrét elem módszerhez használható ütközési modellek különböző változatait és a modell paraméterek számítási módjait mutatja be Horabik és Molenda összefoglaló cikke [13].

A DEM alkalmazható olyan, gravitáción alapuló szemcsés műveletek modellezésére is, ahol mozgó falperemet kell definiálni, de a gázfázis hatása

elhanyagolható. Shen és munkatársai a diszkrét elem módszert szemcsék mozgásának modellezésére alkalmazták szállítószalagon [14], Gallego és munkatársai bordázott falú silók esetében ürítési szimulációkhoz alkalmazták [15], Yazdani és Hashemabadi pedig keveredés modellezésére forgódobban [16]. Ma és Zhao szintén forgódobban vizsgálta ellipszoid alakú szemcsék mozgását [17] DEM-mel. Gyenis és munkatársai keveredés vizsgálatához alkalmazták a diszkrét elem módszert statikus keverőelemeket tartalmazó csövekben [18], You és Zhao pedig speciális alakú granulátumok térkitöltési tulajdonságainak vizsgálatához használta a DEM-et [19].

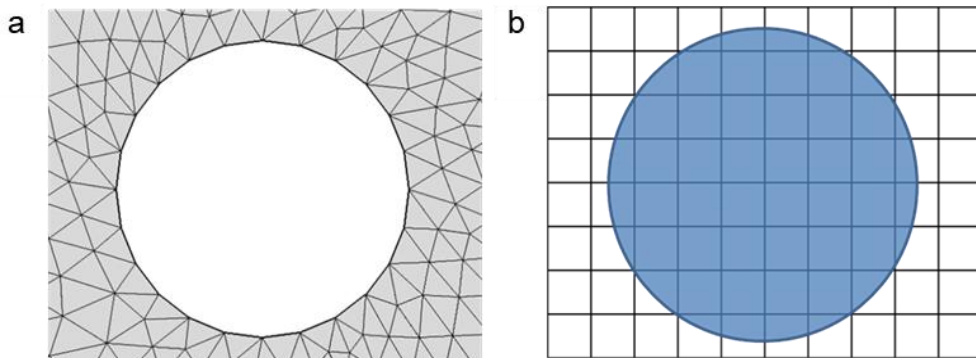
A DEM önállóan is alkalmazható módszer, ekkor csak a szilárd fázis elemeinek mozgását írjuk le. Ha a fluid fázist is számítjuk, és figyelembe vesszük a szilárd részecskékre gyakorolt hatását, akkor már a CFD-DEM módszeről beszélünk, amely fluid-szilárd kétfázisú áramlás számítására alkalmas.

2.3. Direkt numerikus szimulációs módszerek

Az Euler-Lagrange típusú modelleknek a CFD-DEM módszeren kívül egy másik csoportja is létezik, ahol a fluid fázist a hagyományos Euler vagy Navier-Stokes egyenletekkel számítjuk, és a szilárd részecskéket egyedileg kezeljük, azonban a fluid fázis számításában a szilárd részecskék az áramlási térben falakként (peremként) jelennek meg. Direkt numerikus szimulációnak (Direct Numerical Simulation, DNS) nevezik ezt a módszert, amelynek legfőbb jellemzője, hogy ezzel a módszerrel meghatározhatjuk a részecskék közötti részletes áramlási mezőt, a részecskék mozgását pedig a közvetlenül vele érintkező gáz sebessége és nyomása alapján számítjuk. Ebből következik, hogy az ebben az esetben alkalmazott számítási háló cellaméretének a szilárd részecskék méreténél egy vagy több nagyságrenddel kisebbnek kell lennie. A direkt numerikus szimulációk között két módszer terjedt el a fluid fázis számítását illetően. Az első módszerben a fluidum áramlási jellemzőit a mozgó szilárd részecskék felületéhez illeszkedő, úgynevezett body-fitted számítási háló alkalmazásával számítjuk (2.4.a ábra). A második módszer viszont egy szabályos és időben változatlan számítási hálót használ, a részecske fázishatárát pedig virtuális peremként definiáljuk (2.4.b ábra). A virtuális perem alkalmazása azt

jelenti, hogy a részecske nem jelenik meg fizikai falként, peremként, hanem ebben a módszerben a momentumegyenlethez hozzáadunk egy olyan erőtagot (body force), amely úgy módosítja az áramlást, mintha ott valóban egy részecske lenne.

Habár a direkt numerikus szimulációs módszerek a nagy felbontású számítási hálópontok miatt rendkívül számításigényesek, a számítástechnika vívmányai (pl. párhuzamos számítás) egyre inkább lehetővé teszik a nagyszámú részecskét tartalmazó rendszerek szimulációját.



2.4. ábra. A fluid fázis számítási hálója a) body-fitted, b) szabályos, időfüggetlen.

Body-fitted módszerek

A direkt numerikus szimulációs módszerek egyik csoportja, a body-fitted módszer onnan kapta a nevét, hogy a számítási háló a szilárd részecskékhez illeszkedik (2.4.a ábra). A részecskék valós fizikai peremként jelennek meg, és az áramlási változók számításához a hagyományos Euler egyenleteket használjuk. Az egymással kölcsönhatásban lévő szilárd és folyadék fázis esetében azonban nem csak a szilárd fázis változtatja meg a fluid fázis áramlási képét, hanem a fluid fázis áramlásának hatására a részecskék is helyet változtatnak, ezáltal a számítási hálót is újra kell generálni, a fluid fázis változóit pedig a régi rácspontokról az újra kell projektálni [20], azaz interpolációval meghatározni. Ezeket a műveleteket minden időlépésben el kell végezni, rendkívül számításigényessé és lassúvá téve ezzel a megoldást. A body-fitted módszer lépéseit az alábbiakban foglalhatjuk össze.

1. Számítási háló generálása;
2. Áramlási mező számítása;
3. Részecske mozgás számítása;
4. Új számítási háló generálása;

5. Projekció;
6. Vissza a 2. lépéshez, amíg a szimulációs időlépések végére nem érünk.

További nehézséget okoz, hogy ahol az egyik időlépésben még szilárd részecske helyezkedett el, ott az elmozdulás miatt a következő időlépésben már a fluidfázis veheti át a helyet, azonban azon a helyen még előtte nem volt semmilyen értéke az áramlási változóknak (nem volt a számítási domain része), ezért azokra a számítási cellákra extrapolálni kell az adatokat. Ehhez hasonló problémával foglalkozik például Dixon és munkatársainak [21] vagy Rebughini és munkatársainak [22] cikke, ahol az áthidalást, az úgynevezett bridge-ek számítását vizsgálják két szemcse ütközése esetén. Ilyen esetben az áthidaló területet egységes áramlási tulajdonságokkal töltik ki, elhanyagolva ezzel a szemcsék közvetlen közelében lévő áramlási mező egyedi tulajdonságait. Amennyiben nagyon közel vannak egymáshoz a szemcsék, és nem alkalmaznak hidat, akkor a végtelenségig kellene finomítani a számítási hálót, és ez jelentősen megnövelné a számítási igényt.

Immersed Boundary módszer

Immersed Boundary módszernek (Immersed Boundary Method, IBM) nevezzük a direkt numerikus szimulációs módszerek másik nagy csoportját. Ebben a módszerben két számítási hálót használunk, egy euleri számítási hálót a gázfázis számítására, és egy lagrange-i hálót a részecske peremének reprezentációjára. A két számítási háló egymástól független, tehát ha változik a részecske helye, az nem fogja megváltoztatni az euleri hálót. Ebből a tulajdonságból kifolyólag a body-fitted számítási hálókat alkalmazó módszerek hátrányait kiküszöböljük, a számítás jelentősen hatékonyabb és gyorsabb lesz, azonban a virtuális perem kezelésével kapcsolatban számos modellezési kihívással kell szembenéznünk.

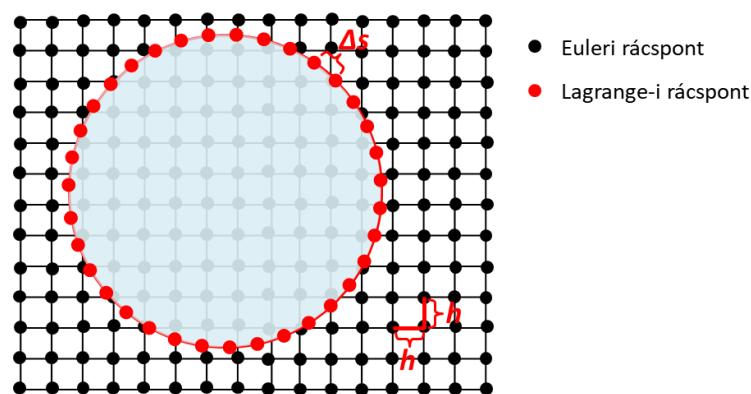
Ha egy részecske mozgását a fluidumban IBM módszerrel szeretnénk modellezni és szimulálni, akkor a következő lépéseket kell végrehajtani.

Részecskemozgás számítása immersed boundary módszerrel

1. A dimenziók megválasztása (2D vagy 3D);

2. A modellegyenletek diszkrétizált alakjának felírása;
3. Az áramlási tér geometriájának kialakítása vagy importálása;
4. Számítási háló létrehozása;
5. A modellegyenletekben szereplő paraméterek definiálása;
6. Kezdeti értékek és a kezdeti peremfeltételek definiálása;
7. A szimuláció időtartamának megadása;
8. Az időlépések számítása;
 - I. Az időlépés nagyságának számítása a stabilitási kritérium alapján;
 - II. Az áramlási változók számítása a diszkrétizált egyenletek és az alkalmazott numerikus módszer alapján;
 - III. Új peremértékek kiszámítása;
 - IV. A szilárd szemcse és a fluidum kölcsönhatásának számítása;
9. Végül az eredmények értékelése, ábrázolás.

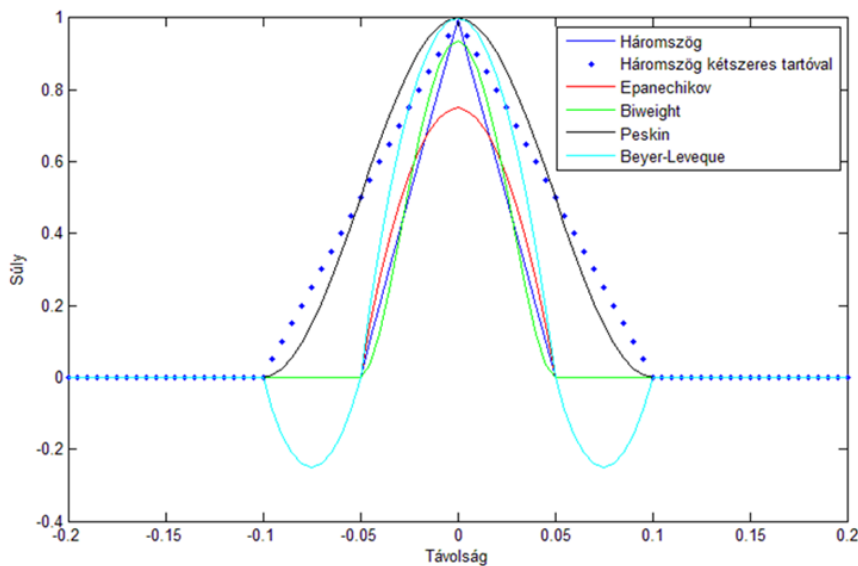
Az immersed boundary módszer használata esetén a fluid fázis számítási hálója egy strukturált számítási háló, amelyet a szilárd részecskék virtuális peremének változása nem változtat meg. Ennek a fix számítási hálónak a rácspontjait euleri pontoknak nevezzük. A szilárd részecskének a pereme mentén is kijelölünk számítási rácspontokat, ezeket lagrange-i pontoknak nevezzük (2.5. ábra). Az euleri és lagrange-i rácsszélességeket a megfelelő számítási pontosság biztosítása érdekében általában azonos nagyságrendben vesszük fel.



2.5. ábra. Az immersed boundary módszer során alkalmazott számítási hálók rácspontjai a rácsszélességek jelölésével (h az euleri rácsszélesség, Δs a lagrange-i rácsszélesség)

Az immersed boundary módszert, az ötletet, hogy a fluid fázis számítási hálója időtől független legyen, elsőként Peskin vezette be szívbillentyűk mozgásának modellezésére véráramban [23]. Azóta a módszernek számos változata született, és napjainkra a leggyakoribb direkt numerikus szimulációs módszer lett, háttérbe szorítva a korábban használt body-fitted számítási hálót alkalmazó módszert [24].

Az IBM kihívásai elsősorban a két fázis egymásra hatásának számításában rejlenek. Először is a mozgó szemcse fizikai határának megállapítása és kezelése sem egyszerű feladat, ugyanis ebben a módszerben a részecskék nem jelennek meg konkrétan falként, hanem csak úgynevezett virtuális peremként. Másodszor pedig a testet körüláramló fluid fázis sebessége befolyással van a szilárd test sebességére. Ezt az oda-vissza hatást fluid-structure interaction-nek (FSI), azaz a fluid-szilárd fázisok közötti kölcsönhatásnak is nevezik [25]. A kihívást az euleri pontokban számított változó értékek felhasználása a lagrange-i pontokban, és fordítva, a lagrange-i pontokban számított értékek euleri pontokban való felhasználása jelenti. Az általam alkalmazott módszer szerint egy interpolációs függvény (δ) segítségével valósíthatjuk meg a kapcsolatot a kétféle számítási rácspont értékei között. Interpolációs függvényekként különféle súlyfüggvényeket használhatunk (2.6. ábra). A függvény tartója adja meg a hatókör szélességét.



2.6. ábra. Néhány példa az euleri és lagrange-i rácspontokon számított változók értékei közötti interpolációhoz használható súlyfüggvényekre [26] [23] [27].

A szilárd és gázfázis közötti kölcsönhatás formális leírását nyújtja diszkrétizált alakban az alábbi két egyenlet (2.5-2.6. egyenletek) két-dimenziós esetben. Ezekre azért van szükség, mert az euleri pontokban nem ismerjük a body force tagot, amelyet a momentumegyenlethez adva az áramlás irányát úgy változtatja meg, hogy a virtuális peremet létrehozza, a lagrange-i pontokban pedig nem ismerjük a fluid fázis sebességét, amely a szilárd részecske sebességére is befolyással van.

$$\mathbf{f}^n(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^M \mathbf{F}^n(\mathbf{X}_j) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_j) \Delta s \quad \text{minden } \mathbf{x}\text{-re} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{U}_b^n(\mathbf{X}_k) = \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^n(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_k) h^2 \quad k=1,2,\dots,M \quad (2.6)$$

ahol $\mathbf{x}$ az euleri pontok koordinátáit, $\mathbf{X}$ pedig az M db lagrange-i pont koordinátáit jelöli. A lagrange-i rácspontok közötti távolság Δs , az euleri rácsszélesség h minden dimenzióban, $\mathbf{f}^n$ és $\mathbf{F}^n$ az egységtérfogatra vonatkoztatott erővektorok az adott euleri és lagrange-i pontban az n . időlépésben, $\mathbf{u}$ és $\mathbf{U}_b$ a sebességvektorok az euleri és lagrange-i pontokban (b a boundary-t (peremet) rövidíti), δ az interpolációs függvény.

A virtuális perem kialakítása érdekében a lagrange-i rácspontok közelében elhelyezkedő euleri számítási cellákban bevezetünk a momentumegyenletbe egy body force erőt (f), amelynek a hatására a fluidum áramlási iránya úgy változik a virtuális peremnek megfelelően mintha ott egy valós peremmel rendelkező részecske helyezkedne el. Ezt a térfogategységre vonatkoztatott erőt (mértékegysége N/m^3) úgy határozzuk meg, hogy segítségével az áramlás sebessége a szemcse falánál a szemcse sebességét érje el. A body force számítására több módszert fejlesztettek ki, a merev szilárd részecskék esetében más megközelítést kell alkalmazni, mint az elasztikusaknál. Mivel alkalmazási példáimban csak merev szilárd részecskékkel foglalkoztam, így a modelljeimben a merev szilárd részecskék esetében alkalmazható direct forcing módszert alkalmaztam, melyet először Mohd-Yusof vezetett be [28], majd Fadlun és munkatársai [29], Lima E Silva és munkatársai [30], valamint Uhlmann [31] további fejlesztéseket végeztek rajta. A módszer lényege, hogy a body force

értékét úgy számítja ki, hogy az áramlási változó értéke a peremhez közeli euler-i pontokban felvegye a lagrange-i pontok sebességét. Példaképpen tekintsük a 2.7. egyenletet, amely egy nem-kompresszibilis közeg áramlását írja le a primitív változókra rendezett alakban.

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} + g \quad (2.7)$$

ahol $\mathbf{u}$ a sebességvektor, p a nyomás, μ a közeg dinamikai viszkozitása, $\mathbf{f}$ a body force vektor, g pedig a gravitációs gyorsulás.

A body force az idő és a hely függvénye, csak azokban a számítási cellákban kap értéket, amelyek a szemcse peremének közelében helyezkednek el. Ha differenciáljuk a 2.7. egyenlet időbeli differenciálhányados tagját és rendezzük az egyenletet, akkor a 2.8. egyenletet az alábbi módon írhatjuk.

$$\frac{\mathbf{u} - \mathbf{u}^0}{\Delta t} = RHS + \mathbf{f} \quad (2.8)$$

ahol $\mathbf{u}$ a fluidum aktuális sebességvektora, $\mathbf{u}^0$ az előző időpillanatbeli sebességvektora, az RHS tartalmazza a 2.7. egyenlet szerinti konvektív és viszkozus tagokat valamint a nyomásgradienst.

A fluidum sebessége egy adott euler-i pontban akkor lesz a szemcse felületének sebességével megegyező, ha a body force értékét az adott pontban a 2.9. egyenlettel számítjuk ki.

$$\mathbf{f} = -RHS + \frac{\mathbf{U}_b - \mathbf{u}^0}{\Delta t} \quad (2.9)$$

ahol $\mathbf{U}_b$ a virtuális perem sebességvektora a lagrange-i pontban (b a boundary-t (peremet) rövidíti).

Az immersed boundary módszer és a többi direkt numerikus szimulációs módszer lehetőséget nyújt a többfázisú rendszerek részletes modellezésére, amellyel a kétfázisú áramlás során lejátszódó folyamatok pontosabban határozhatók meg, mint a térfogatátlagolt áramlási egyenleteket használó módszerekkel. Ugyanakkor ez a megközelítés a finom számítási háló miatt rendkívül számításigényes, így azok a kutatások, amelyek a számítási

hatékonyság javítását célozzák meg, jelentősen hozzájárulhatnak ennek a módszernek a szélesebbkörű alkalmazásához.

2.4. A modellegyenletek diszkretizálásának és numerikus megoldásának módszerei

Az áramlási egyenletek parciális differenciálegyenletek formájában adják meg az áramlási változók idő- és helyfüggését. Az áramló közeg teljes jellemzéséhez szükséges mérlegegyenletek olyan parciális differenciálegyenlet-rendszert alkotnak, melyeknek analitikus megoldása csak speciális esetekben ismert.

Az áramlási egyenleteket formáját tekintve a későbbiekben előforduló *megmaradási alak* kifejezés azt jelenti, hogy az áramlás leírásához használt modell a megmaradási mennyiségek (tömeg, momentum, energia), pontosabban az intenzív megfelelőjük időbeli és helybeli megváltozását írják le. Ezzel szemben *primitív alaknak* nevezzük az áramlási egyenleteknek azt a formáját, amelyekben a helybeli és időbeli differenciálhányados tagok az úgynevezett *primitív változók*, mint a ρ , u , v , w és e változásait írják le.

A modellegyenletek numerikus megoldásához számos módszer áll rendelkezésre, amelyek közül a leggyakoribbak a végeselem módszer, a véges térfogatok és a véges differenciák módszere. A végeselem módszer (Finite Element Method, FEM) alkalmazásában a számítási tartományt véges sok résztartományra osztjuk, és a résztartományokon polinomok lineáris kombinációjával közelítjük a parciális differenciálegyenlet megoldását. A résztartományok általában sokszögek vagy poliéderek (ezen belül síkon háromszögek vagy téglalapok, térben tetraéderek vagy téglatestek). A kutatómunka során fejlesztett programokban az áramlási egyenletek megoldásához a véges differenciák módszerét (Finite Difference Method, FDM) és a véges térfogatok módszerét (Finite Volume Method, FVM) használtam, ezért az alábbiakban röviden ismertetem ezeket a módszereket.

A véges differenciák módszere

A véges differenciák módszere azon alapul, hogy a parciális differenciálegyenletet lineáris algebrai egyenletrendszerre vezetjük vissza [32]. Ennek során az egyenletben szereplő differenciálhányadosokat differencia hányadosokkal (ezek az úgynevezett véges differenciák) közelítjük, és így a megoldást a számítási tartomány diszkrét pontjaiban kapjuk meg. Az áramlási tulajdonságok egyenletei parciális differenciálegyenletek, tekintsük példaként egy kompresszibilis közeg áramlási egyenleteit egydimenziós áramlást feltételezve (2.10-12. egyenlet).

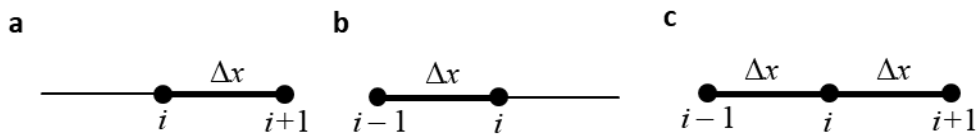
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(u \rho u)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \left[\rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) \right]}{\partial t} + \frac{\partial \left[u \rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) \right]}{\partial x} + \frac{\partial(pu)}{\partial x} = 0 \quad (2.12)$$

ahol ρ a gáz sűrűsége, u a sebessége, p a nyomása, e a belső energiája, t és x pedig az idő- és térkoordináták.

Példaként tekintsük valamely (a fenti példában az egyetlen) térkoordináta szerinti differencia képzésének alapvető, legegyszerűbb lehetőségeit. Ezek az előrelépéses, a hátralépéses és a centrális differenciák (2.7. ábra).



2.7. ábra. A fix lépésközű differenciaképzés alapesetei: a) előrelépéses, b) hátralépéses, c) centrális

Az előrelépéses differenciahányados képzése esetén az adott koordináta mentén az egy lépéssel előbbi és az aktuális helybeli áramlási változó értékek különbségét vesszük, és elosztjuk a koordináta lépésközével (2.13. egyenlet). A hátralépéses esetben az aktuális pozíciótól egy lépéssel előbbi értéket vonjuk ki az aktuálisból (2.14. egyenlet), a centrális esetében pedig az eggyel előbbiből az

eggyel hátrábbit vonjuk ki, és mivel ez két egységnyi lépés volt az adott koordinátatengelyen, ezért a lépésköz kétszeresével osztjuk el (2.15. egyenlet).

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \begin{cases} \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} & \text{előrelépéses differencia} & (2.13) \\ \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} & \text{hátralépéses differencia} & (2.14) \\ \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} & \text{centrális differencia} & (2.15) \end{cases}$$

A magasabb rendű közelítések abban különböznek egymástól, hogy a vizsgált pontra felírt Taylor sor hányadik eleméig vesszük figyelembe, és honnantól vágjuk le a magasabb rendű tagokat. Az FDM jellemző numerikus hibája emiatt az úgynevezett truncation error (csonkolási hiba).

A véges térfogatok módszere

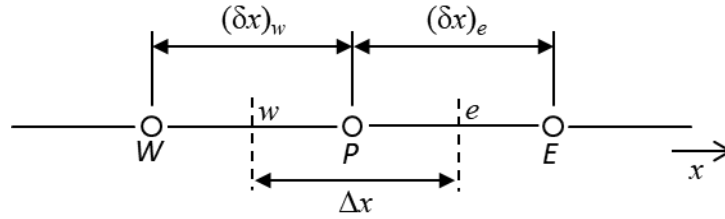
A véges térfogatok módszerének alkalmazása esetében a számítási tartományt véges számú térfogatelemre (2D-ben síkidomokra, 1D-ben szakaszokra) osztjuk, és a térfogatelemre jellemző átlagos változó értéket határozunk meg úgy, hogy integráljuk az áramlási egyenletet a véges térfogaton. Az egyenletek matematikai megfogalmazásához használt térfogatelemet kontroll térfogatnak nevezzük. A módszert McDonald publikálta először 1971-ben [33], és mivel a gázturbinák áramló gázára felírt modellje kétdimenziós volt, a módszert finite area methodnak (véges területek módszerének) nevezte el. A véges térfogatok módszere – szemben a véges differenciák módszerével – olyan számítási hálók esetén is hatékonyan működik, amelyek nem szabályosan strukturáltak.

A módszer bemutatásához vegyük példaként a stacionárius, egydimenziós hővezetés egyenletét (2.16. egyenlet).

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S = 0 \quad (2.16)$$

ahol k a hőátadási együttható, T a hőmérséklet, S a forrástag.

A fenti egyenlet megoldását keressük az x tengely menti pontokban.

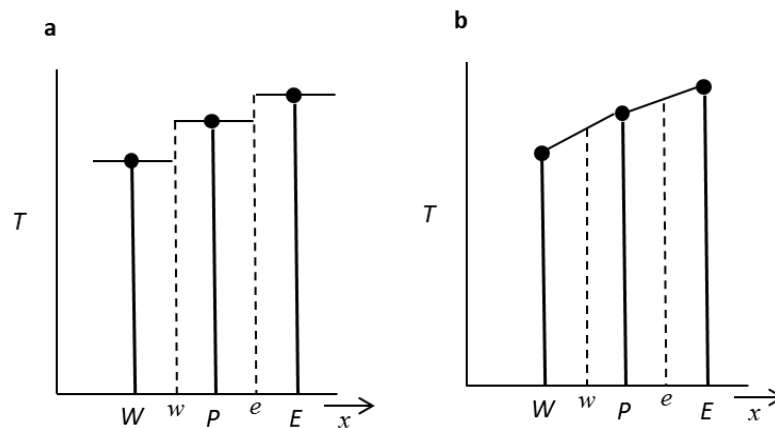


2.8. ábra. A véges térfogatok módszeréhez létrehozott számítási háló 1D-s esetben.

A 2.8. ábra szerinti felosztásban a megoldást a P pontban keressük, melynek szomszédai balról a W pont (west, nyugati szomszéd), jobbról az E pont (east, keleti szomszéd). A vizsgálandó véges térfogat ebben az esetben a szaggatott vonalak közötti szakasz, mely a P pont körül helyezkedik el. A szakasz határait a w és e pontok jelölik. A 2.17. egyenlettel írhatjuk fel a kiemelt szakaszon integrált 2.16. egyenletet.

$$\left(k \frac{dT}{dx}\right)_e - \left(k \frac{dT}{dx}\right)_w + \int_w^e S dx = 0 \quad (2.17)$$

A hőmérséklet x -tengely menti változását feltételezhetjük lépcsőzetesnek, melynek során a számítási cellában a változó értékét konstansnak tekintjük, vagy feltételezhetjük azt is, hogy lineáris összefüggés szerint változik a szomszédos értékeknek megfelelően (2.9. ábra). A példában a hőmérséklet lineáris közelítését alkalmazzuk.



2.9. ábra. A változó értékének alakulása a kontroll térfogaton. a) lépcsőzetes profil, b) pontonként lineáris profil.

Szakaszonkénti lineáris profilt feltételezve a változó értékeiben, a 2.17. egyenletet az alábbi alakban írhatjuk fel (2.18. egyenlet).

$$\frac{k_e(T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w(T_P - T_W)}{(\delta x)_w} + \bar{S}\Delta x = 0 \quad (2.18)$$

ahol $\bar{S}$ az S forrástag átlagos értéke a kontroll térfogatban.

Új jelölések bevezetésével a 2.18. egyenlet felírható egyszerűbb alakban (2.19. egyenlet).

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b \quad (2.19)$$

ahol $a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e}$, $a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w}$, $a_P = a_E + a_W$ és $b = \bar{S}\Delta x$.

A dimenziók növelésével a szomszédok száma is növekszik, ezért általánosabban érdemes a 2.20. egyenlet alakjában felírni az összefüggést.

$$a_P T_P = \sum a_{nb} T_{nb} + b \quad (2.20)$$

ahol nb az adott szomszéd (neighbor) indexe.

Ha az összes pontra felírjuk a 2.19. egyenletet, akkor az egyenletek egy tridiagonális lineáris egyenletrendszer formába rendezhetők, melyet például a TDMA (TriDiagonal Matrix Algorithm) algoritmussal lehet megoldani.

Euler egyenletek összenyomható közegekre

Összenyomható közegek (gázok) esetében a közeg sűrűsége a nyomás vagy hőmérsékletváltozás hatására megváltozhat. Az áramló gázfázis leírására szolgáló háromdimenziós Euler egyenletek a folytonossági egyenletből (2.21. egyenlet), a momentumegyenletekből (2.22-2.24. egyenletek), és az energiaegyenletből (2.25. egyenlet) állnak.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho f_x \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \mathbf{V}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho f_y \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \mathbf{V}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho f_z \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \mathbf{V} \right] = -\frac{\partial(up)}{\partial x} - \frac{\partial(vp)}{\partial y} - \frac{\partial(wp)}{\partial z} + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{V} \quad (2.25)$$

ahol ρ a közeg sűrűsége, t az idő, ∇ a nabla operátor, $\mathbf{V}$ a háromdimenziós sebességvektor, u , v és w az x , y és z irányú sebességkomponensek, p a nyomás, $\mathbf{f}$ a body force, e a belső energia.

A 2.21-2.25. egyenletek 6 ismeretlen változót tartalmaznak (ρ , p , u , v , w , e), ha a body force számításától egyelőre eltekintünk. A 2.26. összefüggés a nyomás és belső energia kapcsolatát írja le, amellyel a rendszert zárttá tehetjük.

$$p = (\gamma - 1)\rho e \quad (2.26)$$

ahol γ az állandó térfogaton és állandó hőmérsékleten érvényes hőkapacitások hányadosa (c_p/c_v).

Gázoknál a viszkozitás hatása nem számottevő, így a kutatómunkámban eltekintettem a viszkozitási tagok alkalmazásától az áramlási egyenletekben. A 2.21-2.26 egyenletrendszer analitikus megoldása nem ismert, ezért numerikus módszereket kell alkalmaznunk a megoldásukra. A viszkozitási (és egyéb másodrendű) tagok, azaz másodrendű differenciálhányadosok nélküli parciális differenciálegyenletek matematikailag a hiperbolikus egyenletek közé sorolhatók. A következőkben azt a hiperbolikus egyenletek megoldására alkalmas véges differenciák módszerét használó módszert mutatom be, amelyet a kutatómunkámban használtam az áramlási egyenletek megoldására.

MacCormack módszer

A MacCormack módszer egy kétlépéses, véges differenciák módszerén alapuló numerikus módszer, amely egy prediktor és egy korrektor lépésből áll. A MacCormack módszer pontossága térben és időben is másodrendű, ugyanis a prediktor lépésben elsőrendű módszer eredménye a korrektor lépésben felhasználásra kerül, így a végeredmény másodrendű lesz. A másod- és magasabbrendű pontosságú módszerek esetében azonban numerikus hibaként oszcilláció léphet fel a megoldás nagy gradiensekkel rendelkező helyeinél,

amelynek egy kezelési lehetőségét a Módszerek és eszközök fejezetben fogom ismertetni. A MacCormack módszert 1969-ben publikálták [34] a Lax-Wendroff módszer [35] továbbfejlesztéseként.

Tekintsük példaként a folytonossági egyenlet megoldását kétdimenziós áramlás esetében. A MacCormack módszer prediktor lépésében a differencia hányadosokat egyszerű előrelépéses (forward) alakban írjuk fel. A 2.27. egyenlettel a sűrűség időbeli változásának sebességét, az időbeli deriváltjának értékét számítjuk ki.

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^n = - \left(\rho_{i,j}^n \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n}{\Delta x} + u_{i,j}^n \frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\Delta x} + \rho_{i,j}^n \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j}^n}{\Delta y} + v_{i,j}^n \frac{\rho_{i,j+1}^n - \rho_{i,j}^n}{\Delta y} \right) \quad (2.27)$$

ahol ρ a közeg sűrűsége, n az időkoordináta, i és j a számítási cellák sorszámai, u és v az x és y irányú sebességkomponensek, Δx és Δy a térkoordináták menti lépésköz.

A prediktor lépésben a következő időpillanatbeli értéket az előző (ismert) időpillanatbeli értékből képzett Taylor sor első két elemével közelítjük. A predikált változót felülvonással jelöljük (2.28. egyenlet).

$$(\bar{\rho})_{i,j}^{(1)} = \rho_{i,j}^n + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^n \Delta t \quad (2.28)$$

Ez így önmagában csak elsőrendű pontosságot jelent, mivel a Taylor sornak csak az elsőrendű tagját vesszük figyelembe. A korrekciós lépésben a predikált változókkal hátralépéses (backward) differenciát alkalmazunk az idő szerinti differenciál-hányados számítására (2.29. egyenlet).

$$\begin{aligned} \left(\overline{\frac{\partial \rho}{\partial t}}\right)_{i,j}^{(1)} = \\ - \left(\bar{\rho}_{i,j}^{(1)} \frac{\bar{u}_{i,j}^{(1)} - \bar{u}_{i-1,j}^{(1)}}{\Delta x} + \bar{u}_{i,j}^{(1)} \frac{\bar{\rho}_{i,j}^{(1)} - \bar{\rho}_{i-1,j}^{(1)}}{\Delta x} + \bar{\rho}_{i,j}^{(1)} \frac{\bar{v}_{i,j}^{(1)} - \bar{v}_{i,j-1}^{(1)}}{\Delta y} + \bar{v}_{i,j}^{(1)} \frac{\bar{\rho}_{i,j}^{(1)} - \bar{\rho}_{i,j-1}^{(1)}}{\Delta y} \right) \end{aligned} \quad (2.29)$$

A következő lépésben képezzük az időbeli deriváltak (2.27. és 2.29. egyenlet) átlagát (2.30. egyenlet). Az av az average (átlag) rövidítése.

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^n + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^{(1)} \right] \quad (2.30)$$

A következő időlépésbeli korrigált értéket pedig ennek felhasználásával kapjuk (2.31. egyenlet).

$$\rho_{i,j}^{n+1} = \rho_{i,j}^n + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av} \Delta t \quad (2.31)$$

Ez is egy elsőrendű közelítés, mivel a Taylor sor magasabbrendű tagjait elhagyjuk. Viszont ebben a második lépésben már felhasználtunk egy elsőrendű pontosságú közelítést, így a végeredmény másodrendű pontosságú lesz mind térben, mind időben.

Mindkét lépésben explicit Euler módszert alkalmaztunk, emiatt az időbeli lépésköz nagyságától függ a megoldás stabilitása. A stabilitáshoz teljesíteni kell a lépésköztre vonatkozó stabilitási kritériumot, amelyet Courant-Friedrich-Lewy (CFL) feltételnek [36] is szokás nevezni (2.32. egyenlet).

$$u_{max} \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (2.32)$$

ahol az u_{max} a számítási tartomány legnagyobb sebességét jelenti, Δt és Δx pedig az idő- és térbeli lépésközt jelöli.

Tehát a maximális időlépés a közeg maximális áramlási sebességétől fordított arányossággal függ. Nagy sebességek esetén ezért a Δt igen kicsi lehet, ebből kifolyólag nagy szimulációs idő eléréséhez sok számítási ciklust kell végrehajtani, így hosszú számítási idővel kell számolnunk. Összefoglalásképpen, a MacCormack módszer szerinti megoldás lépései az alábbiak.

A parciális differenciál egyenlet megoldásának lépései

1. A számítási tartomány kijelölése;
2. A számítási háló kialakítása;
3. A modellegyenletekben szereplő paraméterek definiálása;
4. A kezdeti feltételek és kezdeti peremfeltételek definiálása;
5. A szimulációs iterációs szám megadása;
6. Az iteráció lépései:

- I. Az időbeli lépésköz meghatározása;
 - II. Az előző időpillanatbeli értékekkel az időbeli differenciálhányadosok, majd a predikált értékek számítása;
 - III. A predikált értékekkel az időbeli differenciálhányadosok, majd az átlagos derivált értékekkel az új időpontbeli változó értékeinek számítása;
 - IV. Az új időpontbeli értékek felhasználásával az új peremértékek megadása;
7. A megoldás a következő iterációs lépéssel folytatódik tovább a szükséges szimulációs idő eléréséig.

Navier-Stokes egyenletek összenyomhatatlan közegekre

A nem-kompresszibilis közegek esetében az Euler egyenletet további tagokkal egészítjük ki, amelyekkel figyelembe vesszük a közeg viszkozitását is, mivel a folyadékok esetében már nem elhanyagolható a súrlódás hatása. Ezek másodrendű differenciál tagokat hoznak be a momentum- és energia egyenletbe, így a parciális differenciálegyenletek jellege hiperbolikus helyett parabolikus lesz. A viszkozitási tagokat tartalmazó áramlási egyenleteket Navier-Stokes egyenleteknek nevezzük. Összenyomhatatlan közegek esetében a folytonossági egyenlet egyszerűbbé válik, hiszen a fluidum sűrűsége nem változik ha állandó hőmérsékletet feltételezünk. Ha nincs jelentős hőmérsékletváltozás (például nincs exoterm reakció vagy nem fűtjük a rendszert kívülről), akkor az energiaegyenlet felírása szükségtelen, így ezzel is egyszerűsödik a modellegyenlet-rendszer. Példaként nézzük a Navier-Stokes egyenleteket kétdimenziós esetre felírva, primitív változókkal kifejezve (2.33-2.35. egyenletek).

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2.33)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} - \rho f_x = 0 \quad (2.34)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} - \rho f_y = 0 \quad (2.35)$$

A viszkozitási tagokat a 2.36-2.38. összefüggésekkel adhatjuk meg.

$$\tau_{xx} = \frac{4}{3}\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.36)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \frac{\partial v}{\partial x} + \mu \frac{\partial u}{\partial y} \quad (2.37)$$

$$\tau_{yy} = \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{4}{3} \mu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.38)$$

ahol μ a közeg dinamikai viszkozitása.

A viszkózus, nem-kompresszibilis közegek áramlási egyenleteinek megoldására gyakran alkalmazott módszer a nyomáskorrekciós módszer. A nyomáskorrekciós módszerből többféle változatot is kifejlesztettek, amelyek közül néhányat röviden a következő alfejezetben mutatok be, valamint egy kiválasztott módszert részletesen is ismertetek.

A nyomáskorrekciós módszer

Nem-kompresszibilis közegek esetében a közeg nyomását nem számíthatjuk gáztörvény alkalmazásával, helyette a sebesség- és nyomásértékek között kell kapcsolatot létrehozni és egy olyan nyomásmezőt meghatározni, amely divergenciamentes sebességmezőt biztosít a 2.33. egyenletnek megfelelően. Egy ilyen módszert először Patankar és Spalding mutatott be [37], amely később a SIMPLE nevet kapta (a betűszó a Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations-ből ered). A SIMPLE módszernek több továbbfejlesztett változata is létezik (pl. SIMPLER – SIMPLE Revised [38], SIMPLEC – SIMPLE Consistent [39]). Később Issa is publikált egy algoritmust a probléma megoldására [40], amely PISO rövidítéssel lett ismert (Pressure-Implicit with Splitting of Operators). A két módszer jellemzőit egyesíti a PIMPLE módszer, amelyet az OpenFOAM nevű nyílt forráskódú CFD szoftver használ [41]. A felsorolt módszerek mindegyikének lényege a sebesség és a nyomás közötti kapcsolat kialakítása.

A folyadék-szilárd kétfázisú rendszerek áramlástanai modellezéséhez a SIMPLE módszert implementáltam kétdimenziós áramlási esetre. A SIMPLE algoritmus lényege, hogy egy becsült nyomásmezőből kiindulva kiszámítjuk a becsült sebességmezőt a momentumegyenlet felhasználásával. A becsült sebességmezőből a folytonossági egyenlet felhasználásával kiszámítjuk a nyomáskorrekciót, amely alapján korrigáljuk a nyomás- és a sebességmezőt is. A korrekciós lépéseket addig folytatjuk, míg a folytonossági egyenletnek eleget nem tesz a megoldás. A modellegyenletek diszkretizálásához praktikus a véges

térfogatok módszerét alkalmazni. A diszkretizált egyenletrendszer átalakítható úgy, hogy egy adott dimenzió mentén az ismeretlen áramlási sebességekre nézve egy tridiagonális mátrix alakot öltön, amely lehetővé teszi az áramlási egyenletek implicit megoldását. A tridiagonális egyenletrendszerek egy bevált megoldási algoritmus a Llewellyn Thomas által kidolgozott TDMA (TriDiagonal Matrix Algorithm) [42]. A korábbi alfejezetekhez hasonlóan a módszer összefoglalását ezúttal is az algoritmus lépéseinek leírásával adom meg.

A nem-kompresszibilis közegre felírt Navier-Stokes egyenletek megoldási lépései SIMPLE módszerrel

1. A számítási tartomány kijelölése;
2. A számítási háló kialakítása;
3. Az időlépés lépésközének megadása;
4. Az időlépések számának megadása;
5. A modellegyenletekben szereplő paraméterek definiálása;
6. Módszerspecifikus paraméterek megadása (pl. az iterációból kilépés kritériumához küszöbérték megadása);
7. A kezdeti feltételek és kezdeti peremfeltételek definiálása;
8. Becsült nyomásmező megadása;
9. Az iteráció lépései az egyes szimulációs időpillanatokban:
 - I. A nyomáskorrekció iterációs lépései:
 - a. A sebességek kiszámítása a momentumegyenletek megoldásával (véges térfogatok módszere, TDMA);
 - b. Nyomáskorrekció számítása;
 - c. Korrigált nyomás kiszámítása a becsült nyomásból és a nyomáskorrekcióból;
 - d. Korrigált áramlási változók kiszámítása a nyomáskorrekció felhasználásával;
 - e. Peremértékek újraszámítása;
 - f. Hibellenőrzés: ha a küszöbértéken belül van a hibaérték, akkor kilépés az iterációból és folytatás a következő időpillanat iterációjával. Ha küszöbértéken kívül van a hibaérték, akkor a nyomáskorrekciós iteráció folytatása.

II. Eredmények megjelenítése (opcionális);

10. Végül az eredmények értékelése, ábrázolás.

Az implicit megoldási módszer biztosítja a numerikus megoldás stabilitását, az időlépés lépésközét az észszerűség keretein belül tetszőlegesen megválaszthatjuk.

3. Módszerek és eszközök

Ebben a fejezetben röviden bemutatom a kutatómunkám során alkalmazott módszereket, számítógépes eszközöket és laboratóriumi berendezéseket. Bővebb, alkalmazásorientált részletek az esettanulmányok kapcsán kerülnek elő.

3.1. COMSOL Multiphysics szoftver

Kutatásaim egy részéhez a kereskedelmi CFD szoftverek közül a COMSOL Multiphysics programot választottam. A programcsomag rendkívül széles körű mérnöki problémamegoldásra alkalmas, köztük például elektromágneses jelenségek szimulációjára vagy akusztikai rendszerek modellezésére. Az általam is használt modul elsősorban áramlástani és hőátadási szimulációk készítésére használható. Az áramlástani szimuláció lépései COMSOL Multiphysics segítségével a következőképpen adhatók meg.

Áramlástani szimuláció lépései COMSOL Multiphysics segítségével

1. A dimenziók megválasztása (1D, 2D, tengelyszimmetrikus 2D vagy 3D);
2. A modellegyenletek kiválasztása (pl. lamináris áramlás egyenletei);
3. A geometria kialakítása vagy importálása;
4. A modellegyenletekben szereplő paraméterek definiálása;
5. A peremfeltételek rögzítése;
6. A számítási háló kialakítása;
7. A modell megoldása (a program által megválasztott beépített módszerekkel);
8. Végül az eredmények értékelése, ábrázolás.

Az eredmények értékelésére és ábrázolásukra számos lehetőséget kínál a program, köztük 3D-s modellekben metszeteket jeleníthetünk meg, egy-egy kiválasztott változó értékeinek térbeli eloszlását is ábrázolhatjuk, dinamikus szimuláció esetén pedig a szimulált berendezésben végbemenő változásokat akár videóként is rögzíthetjük vagy elmenthetjük későbbi feldolgozásra. Az ábrázolt eredmények sok esetben interaktívan manipulálhatók (térben forgatás, nagyítás stb.), ezzel szemléletesen bemutatatható a kapott megoldás. A nyers eredmények alapján összetett lekérdezéseket is végezhetünk, például felületi (peremre történő)

vagy térfogati integrálással vagy átlagolással, primitív változókból matematikai művelettel meghatározhatunk egy összetett változót és annak tetszés és lehetőség szerinti ábrázolásával élhetünk stb. A COMSOL Multiphysics rendelkezik alkalmazás programozói interfésszel is, azaz azon eljárásainak dokumentációjával, amelyeket más szoftverek használhatnak. Ezáltal lehetséges a kidolgozott modellek iteratív célú futtatása, amelyben valamilyen optimalizálási célt fogalmazunk meg, mint például az optimális geometria paraméterek vagy peremfeltételek meghatározása. Kutatómunkám során főként a MATLAB szoftverrel összekapcsolva használtam a COMSOL Multiphysics programozói interfészét. Az alkalmazás programozói interfész használatának előnye, hogy az elkészült CFD modelleket kevesebb interakcióval tudjuk futtani és az eredményeket is automatikusan elmenthetjük. A COMSOL Multiphysics programcsomagnak sok előnye mellett egy hátránya, hogy a modellegyenleteken és megoldási módszereiken nem, vagy csak nagyon korlátozott mértékben lehet módosítani. A COMSOL Multiphysics alkalmazása a többfázisú áramlások CFD-DEM és direkt numerikus szimulációjában limitált (részben az imént említett okok miatt), leginkább a térfogatátlagolt áramlási egyenleteket használó two-fluid módszer esetében lehet hatékonyan alkalmazni. A direkt numerikus szimulációban történő alkalmazására ad lehetőséget a program Moving Mesh funkciója, amely az irodalmi bevezetésben bemutatott body-fitted direkt numerikus szimuláció esetében lehet hasznos a mozgó részecskék elhelyezkedését követő számítási háló generálásában. A Level Set funkcióval a kétfázisú rendszerben a fázishatár helyét egy függvény segítségével adhatjuk meg. A következő alfejezetekben a COMSOL Multiphysics azon elemeit és lehetőségeit mutatom be, amelyek a kutatómunkám szempontjából kiemelt jelentőséggel bírnak. Először az előbb említett Level Set módszert ismertetem, ezt követően a program szemcsekövetésre alkalmas modulját mutatom be, végül szót ejtek röviden a turbulenciamodellekről, mivel a vizsgált esettanulmányok szempontjából ezek fontosak.

Level Set módszer

A kétfázisú rendszerek fázishatárának megadására és követésére szolgáló módszer a level set függvényt alkalmazó módszer, melynek matematikai alapjait Osher és Sethian dolgozta ki [43]. A módszer lényege, hogy a fázishatár követésére definiált folytonos függvény (Φ) a kétfázisú rendszer geometriájának számítási celláiban 0 és 1 közötti értéket vehet fel az egyik kitüntetett fázis térfogati hányadának megfelelően. Foley a COMSOL Multiphysics szakmai blogjában egy felfelé mozgó olajcsepp vízben való mozgásának modellezésével mutatta be a programelem alkalmazhatóságát [44]. Ez a példa a program alkalmazási galériájában is elérhető [45]. A Level Set módszert szilárd részecske folyadékban való ülepítésének szimulációjára alkalmaztam úgy, hogy a szilárd részecskét nagy viszkozitású folyadék gömbnek tekintettem. A módszer alapelveit a következőkben mutatom be.

A level set függvényt jelöljük Φ -vel. Háromdimenziós esetben a teljes számítási tartományon értelmezett folytonos függvényt a 3.1. egyenlet írja le.

$$\Phi(x, y, z) = a \quad (3.1)$$

ahol a egy konstans. A fázishatár a függvény értékében egy ugrásfüggvényként jelenik meg, például ahol $\Phi < 0,5$ ott többségében az egyik fázis, $\Phi > 0,5$ esetén a másik fázis van jelen. A level set módszer nagy előnye, hogy az alkalmazásával alakváltozások, például buborékok szétválása és összeolvadása jól követhető [46]. A fázishatár helyváltozását az őt körülvevő közeg sebessége határozza meg a 3.2. egyenlet alapján [47].

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = \gamma \nabla \cdot \left(\varepsilon \nabla \Phi - \Phi(1 - \Phi) \frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|} \right) \quad (3.2)$$

ahol $\mathbf{u}$ a közeg sebességvektora, γ az újraszámítási (reinicializációs) paraméter [m/s], és ε a fázishatár szélessége (vastagsága) [m].

Az egyenlet baloldalán lévő tagok írják le a határfelület mozgását, a jobboldalon lévő tagok pedig a numerikus stabilitáshoz szükségesek [47]. A γ a frissítés sebességét adja meg, stabilitási kérdések miatt javasolt a közeg sebességének maximumával definiálni. Az ε fázishatár szélességét, a Φ függvény

átmeneti tartományát jelöli ki. Ezt általában a maximális hálóelem méret felére állítják. A sűrűséget (ρ) és a dinamikai viszkozitást (μ) az egyes r számítási pontokban a 3.3. és 3.4. egyenletekkel kapjuk meg.

$$\rho(r) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)\Phi(r) \quad (3.3)$$

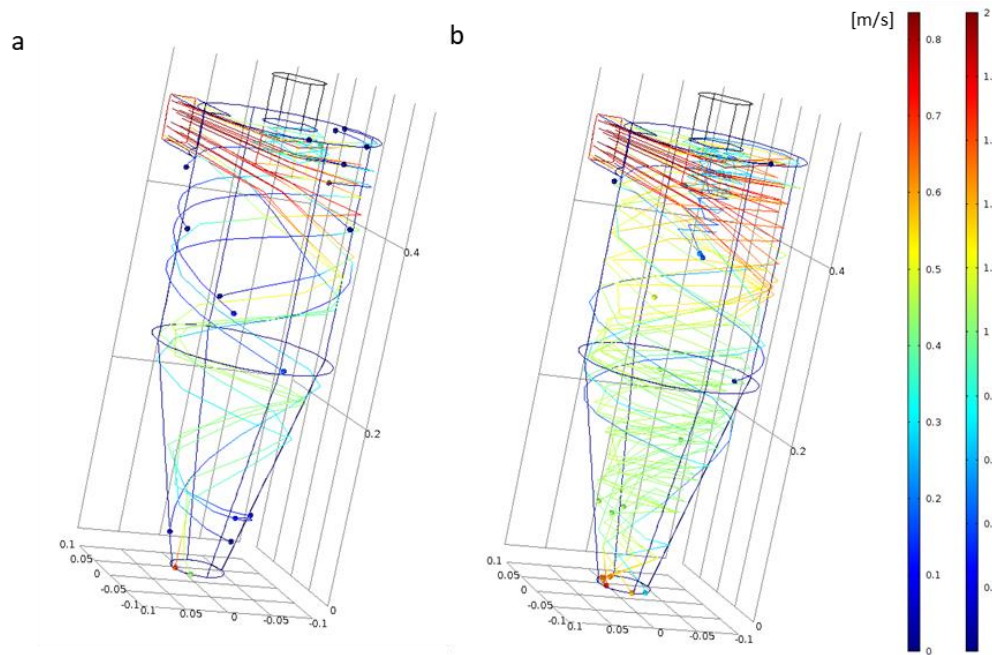
$$\mu(r) = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)\Phi(r) \quad (3.4)$$

ahol az 1 és 2 indexek a különböző fázisokat jelölik.

Mivel a szilárd testeknek nincs viszkozitásuk, a módszer inkább a nem elegyedő fluidfázisok fázishatár követésére alkalmas. Az egyik esettanulmány kapcsán a szilárd merülő testet nagy viszkozitású folyadék gömbnek tekintetem, de ahogy a 4.5. fejezet eredményeiben látható lesz, a részecske merevségének kritériuma nem teljesült megfelelő mértékben. Az ezzel kapcsolatos eredményeimet a szilárd test ülepítését bemutató szimulációs esettanulmányban ismertetem.

Szemcsékövetés (Particle Tracing)

A COMSOL Multiphysics Particle Tracing modulja egy széleskörű használatra tervezett eszköz, amellyel részecskék mozgásának szimulációját lehet létrehozni különféle környezetben és közegben, például egy áramlási térben, egy töltéssel rendelkező térben vagy mágneses térben is. A Particle Tracing modulban megadhatjuk paraméterként a szemcsék méretét, tömegét, hőmérsékletét, darabszámát, kezdeti pozíciójukat. A program a közeg és a szemcsék tulajdonságainak felhasználásával kiszámítja a szemcsékre ható gravitációs erőt és a közegellenállási erőt. Egy korábbi munkám eredményét mutatja a 3.1. ábra, ahol különböző sűrűségű részecskék leválasztásához terveztem ciklont. A részecskék trajektóriáját az előzetesen kiszámított sebességi mezőt felhasználva és a szemcsék tulajdonságai alapján a közegellenállási erő és gravitációs erő határozza meg.



3.1. ábra. 20 db $1\ \mu\text{m}$ átmérőjű részecske mozgásának szimulációja egy porleválasztó ciklonban. A részecskék sűrűsége: a) $1100\ \text{kg/m}^3$, b) $3700\ \text{kg/m}^3$.

A szemcsekövetés arra is alkalmas, hogy a fluidum egy fáziselemének mozgását kövessük, így a pozíciójáról, más fáziselemekkel történő keveredéséről információt nyerhetünk. Ebben az esetben a szemcsét pontszerűnek tekintjük és anyaga a közegével megegyező. Kutatásaimban szemcsekövetési szimulációt a 4.2. fejezetben bemutatásra kerülő esettanulmányban használtam, amelyben egy jetkeverő keverési teljesítményét vizsgáltam. A vizsgálatban nem volt szükség sem gravitációs erő, sem közegellenállási erő figyelembe vételére. A Particle Tracing modul az általam használt beállításokkal az áramlási vonalakat felhasználva, arra szuperponálva végig tudja követni az áramlási vonalakat a részecskékkel, ezáltal hatékonyan lehet használni keveredési vizsgálatok céljára. A Particle Tracing módszer nem alkalmas kétfázisú áramlás pontos szimulációjára, mivel a felhasznált sebességmező stacionárius, a valóságban pedig mind a sebességmező mind a részecskék pozíciója dinamikusan változik.

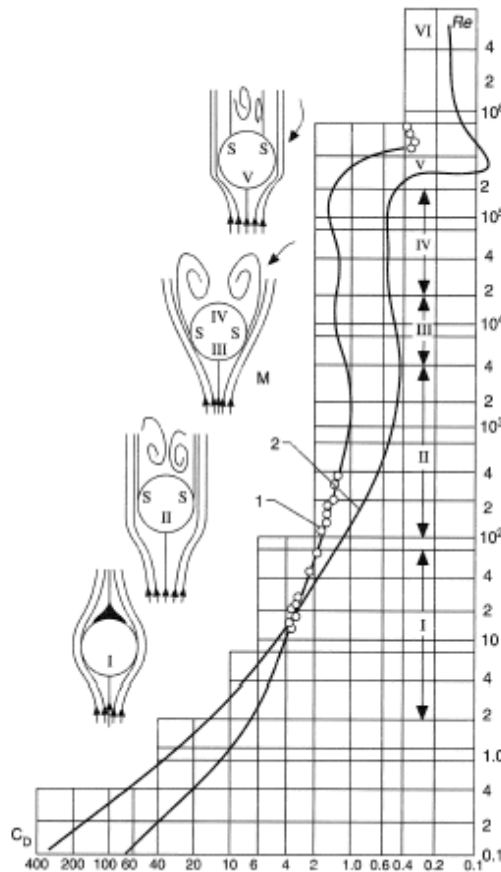
Turbulenciamodellek

Az áramlás jellege lehet lamináris vagy turbulens. Laminárisnak nevezzük az áramlást, ha a közeg rétegesen áramlik, és a fluidum részecskéinek mozgási iránya az áramlással párhuzamos. Ezzel szemben turbulens az az áramlás, amely

esetében az áramló közeg fizikai jellemzői (például a nyomás, a sebesség) gyorsan, kaotikusan változnak, és az áramló közegben örvények képződnek. Az áramlási tartomány meghatározására alkalmas dimenziómentes mérőszám a Reynolds szám, amely az inerciális (tehetetlenségi) és a viszkozus (súrlódási) erők arányából származtatható, egyszerűsített formájában a 3.5. egyenlet alapján számítható.

$$Re = \frac{vL\rho}{\mu} \quad (3.5)$$

ahol v a sebesség, L a karakterisztikus hossz, ρ a közeg sűrűsége, μ pedig a dinamikai viszkozitása. Körülbelül 2300 fölötti Re szám esetén beszélhetünk turbulens áramlásról [48], de a tisztán lamináris áramlás már 90 körüli Re szám esetén módosul, ha gömböt vagy kör keresztmetszetű testet helyezünk az áramlásba, Kármán örvényeket képezve a test mögött (3.2. ábra).



3.2. ábra. Áramlási tartományok henger (2D, 1-essel jelzett görbe) és gömb (3D, 2-essel jelzett görbe) esetén. A vízszintes tengelyen a közegellenállási állandó (C_D), a függőlegesen a Reynolds szám (Re) szerepel. [49]

A turbulencia modellezésére számos módszert dolgoztak ki, melyeknek két nagy csoportja a Reynolds-átlagolt Navier-Stokes (RANS) egyenleteket alkalmazó módszerek és a Nagy örvények szimulációja (Large Eddy Simulation, LES). Az első csoportba tartozó modell például az egy egyenletes Spalart-Allmaras modell, vagy a kétegyenletes k - ε és a k - ω módszerek. A LES módszerek esetében az áramlási egyenletekből egy aluláteresztő szűrő alkalmazásával a kis örvényeket, melyek hatásának számítása sok erőforrást venne igénybe, elhanyagolják. Itt kell megemlíteni, hogy a direkt numerikus szimulációs (DNS) módszerek esetében nincs szükség turbulenciamodellekre, mert a részletes számítás miatt a turbulencia hatása már belekerül az eredménybe.

A stabilitása és kis memóriaigénye miatt legnépszerűbb turbulenciamodell a k - ε modell [50], amely a turbulencia intenzitásának jellemzésére a sebességingadozásoktól függő k turbulens kinetikus energiát, és ennek ε disszipációját használja. A COMSOL Multiphysics-ben rendelkezésre álló turbulenciamodellek közül számításaimhoz a k - ε modellt használtam.

3.2. Hálófüggetlenségi vizsgálat

A numerikus áramlástani szimulációk esetén a számítási háló kialakítása, annak felbontása jelentősen befolyásolhatja a megoldás pontosságát és számítás időigényét, ezért gyakran a modell validáció része a hálófüggetlenségi vizsgálat. A hálófüggetlenségi vizsgálat során valamely modellegyenlet mérleghibáját vizsgáljuk a hálófelbontás függvényében. A vizsgálat végeredményeként azt a legdurvább felbontású számítási hálót kell alkalmaznunk, amelyet ha tovább finomítanánk, már nem javítana jelentősen a mérleghibán. A háló finomsága abból a szempontból is fontos, hogy a számítási idő a hálóelemek számának növekedésével arányosan nő. A hálófüggetlenségi vizsgálat során azt bizonyítjuk, hogy a megoldás már nem függ a felosztástól, a kellően finom felosztású háló esetén közel azonos megoldást ad. Célszerű a hálófüggetlenség állapotát elérő első felosztást alkalmazni, hiszen ha a mérleghibát nem tudjuk a finomabb diszkretizálással csökkenteni, akkor miért növelnénk feleslegesen a számítási időt. A hálófüggetlenségi vizsgálat egy olyan validációs módszer, melyben a megoldást önmagával, annak változataival validáljuk. Önmagában az eredmény

érvényességéhez ez nem elegendő, a modelleknek és megoldásaiknak fizikai berendezésen végzett kísérletek során nyert mérési eredményekkel való összehasonlítás próbáján is át kell esniük.

3.3. Tartózkodási idő analízis

A tartózkodási idő eloszlás (residence time distribution, RTD) koncepciója még az ötvenes évekből, Danckwerts-től ered [51]. Berendezések hidrodinamikai vizsgálatához gyakran alkalmaznak tartózkodási idő analízist. Folyamatos üstreaktor esetében Gamba és munkatársai végeztek RTD-n alapuló tanulmányokat [52], vagy például Adeosun és Lawal is a tartózkodási idő analízis módszerét alkalmazták mikroméretű T-alakú csatorna keveredési jellemzőinek meghatározásához [53].

Az RTD görbe kísérleti úton úgy határozható meg, hogy mérjük vagy számítjuk a rendszer válaszát egy vizsgálójelre. A vizsgálójel lehet impulzusszerű, egységugrás, valamilyen periodikus vagy pseudo-random vizsgálójel. Fizikai kísérletek során nemreaktív jelölőanyag bevezetésével valósítjuk meg a vizsgálójelet. A leggyakrabban az impulzusszerű és az egységugrás vizsgáló jelet használják, ezeket kísérletileg is egyszerűbb megvalósítani, és a válaszuk értelmezése is könnyebb. Az impulzusszerű jel ideálisan a Dirac delta függvénnyel egyezik meg (0 szélesség, végtelen magasság), azonban a gyakorlatban ez inkább téglalapfüggvény-szerűen valamilyen rövid időtartamban injektált adott mennyiségű jelölőanyag bevezetését jelenti. A vizsgáló jelre adott válaszfüggvényt a kimeneten időpillanatonként mért vagy számított jelzőanyag koncentrációból kapjuk meg. Ebből transzformáció segítségével RTD görbét kaphatunk, ha a koncentrációértékeket elosztjuk a koncentráció görbe (C_{pulse}) alatti területtel (3.6-3.7. egyenletek) [54].

$$A = \int_0^{\infty} C \, dt \cong \sum_i C_i \Delta t_i \quad (3.6)$$

$$RTD = \frac{C_{pulse}}{A} \quad (3.7)$$

Ezzel azt érjük el, hogy a görbe alatti terület 1 legyen. Az átlagos tartózkodási időt a 3.8. összefüggés alapján számíthatjuk.

$$\bar{t} = \frac{\int_0^\infty tC dt}{\int_0^\infty C dt} \cong \frac{\sum_i t_i C_i \Delta t_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} \quad (3.8)$$

Az RTD kísérleti meghatározására is mutatok majd példát az esettanulmányok ismertetése során. A többfuratos jetkeverő esetében a tanszék saját laboratóriumában került sor festékanyag befecskendezését követően videofelvételre, majd azt felhasználva az RTD görbét videofeldolgozási módszereket alkalmazva határoztuk meg.

Szimulációs vizsgálatokban is alkalmaztam RTD analízist berendezések hidrodinamikájának jellemzésére vagy az átlagos tartózkodási idő megállapítására. A szimulált esetekben először ki kell számítani a stacionárius áramlási állapotot, majd ezt felhasználva egy komponensmérleg megoldásával számíthatjuk a jelzőanyag koncentrációjának időbeli változását az elvétel helyén. A vizsgálójel a szimulációban is különféle függvénnyel adható meg. Számításaimban impulzusszerű vizsgálójelet alkalmaztam.

Az átlagos tartózkodási idő ismerete nagy jelentőséggel bír a műveleti egységek tervezésében. A tartózkodási idő eloszlás (RTD) és az átlagos tartózkodási idő ($\bar{t}$) modell alapján nyert, és mérés során kapott értékeinek összehasonlítása a modellvalidáció egyik lehetséges és gyakran alkalmazott módszere.

3.4. Cellás modellezés

A valós berendezések hidrodinamikája legtöbbször nem közelíthető ideális áramlású egységek, mint a dugóáramlású cső és a tökéletesen kevert egység modelljével, ezért ezeknek valamilyen kombinációját használhatjuk. Az ilyen kombinált modelleket cellás modelleknek (compartment model, CM) hívjuk. A cellás modellek építőelemeként a két ideális hidrodinamikai egység mellett definiálhatunk még elosztó és keverő egységeket is. A cellás modellek komplexitás tekintetében átmenetet képeznek az ideális hidrodinamikai modellek és a CFD modellek között. A cellás modellen alapuló szimulációk kevésbé

számításigényesek, mint a CFD szimulációk, ugyanakkor a CM is alkalmas összetettebb geometriájú készülékek hidrodinamikájának leírására, mint például az ebben a dolgozatban is bemutatott biomassa elgázosító reaktor modellezésére [55]. Cellás modellt alkalmaztak például Znad és munkatársai biológiai rendszerek (pl. fermentorok) modellezésére [56], Arora és munkatársai fluidizációs berendezés modellezéséhez [57], vagy Kong és munkatársai elgázosító reaktorok vizsgálatához [58].

A tökéletesen kevert egység (TKE) modelljét a 3.9-3.11. egyenletek mutatják, amelyben a jelzőanyag koncentrációjának változását írjuk le.

$$F_{ki} = F_{be} \quad (3.9)$$

$$\frac{dc}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (c_{be} - c) \quad (3.10)$$

$$c(t = 0) = 0 \quad (3.11)$$

ahol F a térfogatáram, V az üst térfogata, c a jelzőanyag koncentrációja.

A V térfogatú dugóáramú egység (ideális cső) modellje N db TKE kaszkádjából adódik a 3.12-3.15. egyenletek szerint. A kaszkád egységek térfogata $V_n = V/N$, $n=1 \dots N$.

$$F_{be}^n = F_{ki}^n \quad n=1 \dots N \quad (3.12)$$

$$\frac{dc^1}{dt} = \frac{F}{V_n} \cdot (c_{be} - c^1) \quad (3.13)$$

$$\frac{dc^n}{dt} = \frac{F}{V_n} \cdot (c^{n-1} - c^n) \quad n=2 \dots N \quad (3.14)$$

$$c^n(0) = c_0^n \quad n=1 \dots N \quad (3.15)$$

ahol n a kaszkád egység sorszáma, t az idő, c_{be} az első egységbe belépő jelzőanyag koncentrációja.

Minél több kaszkád elemre bontjuk fel az eredeti V térfogatot, annál jobban közelítjük az ideális cső áramlási modelljét.

Az áramosztó (E) modelljében a térfogat nem szerepel paraméterként, a szétosztott áramok térfogatának összege megegyezik a belépő térfogattal. Az egy

bemenettel és két kimenettel rendelkező áramosztó kimeneti térfogatáramait és koncentrációját a 3.16-3.18. egyenletek írják le.

$$F_{ki,1} = \alpha \cdot F_{be} \quad (3.16)$$

$$F_{ki,2} = (1 - \alpha) \cdot F_{be} \quad (3.17)$$

$$c_{ki,1} = c_{ki,2} = c_{be} \quad (3.18)$$

ahol F a térfogatáram, α az elosztási arány (0 és 1 között változhat), c a koncentráció.

Az áramkeverő (K) modelljében sem szerepel a térfogat paraméterként, a bejövő áramok térfogatának összege megegyezik a kimenő térfogattal. Működését a 3.19-3.20. egyenletek írják le a két bemenet és egy kimenetes esetben.

$$F_{ki} = F_{be,1} + F_{be,2} \quad (3.19)$$

$$c_{ki} = \frac{F_{be,1} \cdot c_{be,1} + F_{be,2} \cdot c_{be,2}}{F_{be,1} + F_{be,2}} \quad (3.20)$$

A cellás modellek algebrai differenciálegyenlet-rendszerek, megoldásukhoz explicit módszert alkalmazunk. A cellás modell numerikus megoldásában ezért fontos paraméter a numerikus lépésköz (Δt), amelyet minél kisebbre állítunk annál pontosabb eredményt kapunk.

A cellák közötti kapcsolatot egy úgynevezett kapcsolati mátrix-szal adhatjuk meg, amelyben az oszlopok a cellákat, a sorok az áramokat jelentik, és 0, 1 vagy -1-gyel vannak feltöltve aszerint, hogy az adott áram az adott eszközbe be- (ezt 1-gyel jelölük) vagy kimegy-e (ezt -1-gyel), vagy nem érinti (ezt pedig 0-val). Egy példát a cellás modellre az egyik esettanulmányom kapcsán, a 4.1. fejezetben mutatok be.

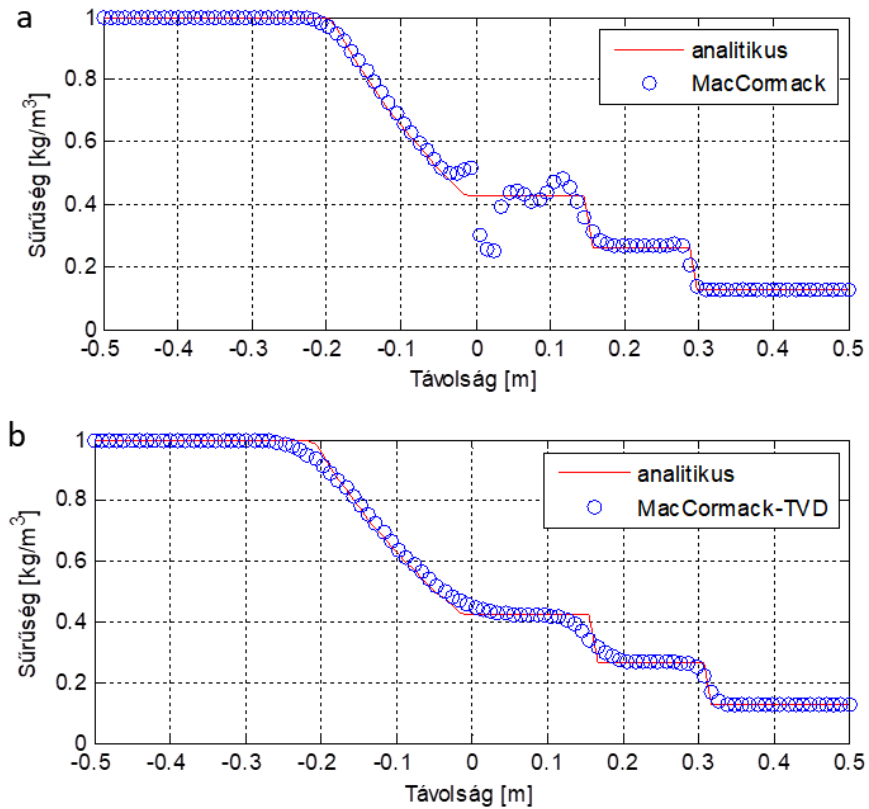
Összefoglalva, a cellás modellek kompromisszumos megoldást jelentenek az ideális hidrodinamikai modellek és a CFD modellek között. Az ideális hidrodinamikai modellek önmagukban nem elegendőek egy valós, bonyolultabb geometriával rendelkező berendezés áramlási viszonyainak vizsgálatára, a CFD modellek viszont sok esetben szükségtelenül részletesek és számításigényesek. A kétfázisú rendszerek áramlási modellezéséhez a cellás modellezési megközelítés

önmagában nem elegendő, az csak a folytonos fázis áramlásának leírására ad lehetőséget.

3.5.A numerikus módszerek verifikálása

Az áramló rendszerek makroszkopikus leírására szolgáló modellegyenletek, ahogy a 2.4. fejezetben is láthattuk, legtöbbször parciális differenciálegyenlet-rendszert alkotnak. Ezeknek a különféle osztályokba sorolható egyenlettípusoknak a megoldására számos numerikus, tér- és időbeli diszkretizáláson alapuló módszer született. A numerikus módszereknek nagy a számítási igényük, és a számítások végrehajtása során numerikus hibák adódhatnak.

A numerikus módszer validálása során a numerikus módszerrel nyert megoldást összehasonlítjuk az ismert analitikus megoldással. Mivel az áramlási egyenletek numerikus megoldása is a kutatómunkám részét képezte, ezért ellenőriztem az általam használt numerikus módszer pontosságát olyan áramlási példát alapul véve, amelyre található analitikus megoldás is. Egy ilyen áramlási példa a két különböző nyomású térrészt elválasztó lemez (diafragma) eltávolítása után bekövetkező áramlási jelenség, amelyet az angol nyelvű szakirodalomban legtöbbször „shock tube” problémának neveznek. Az első validálási eredmények ezzel a példával Sod nevéhez köthetők [59]. Munkám során az áramlási egyenletek megoldásában a 2.4.4. alfejezetben ismertetett MacCormack módszert használtam. A shock tube probléma MacCormack módszerrel történő megoldás eredményét hasonlítottam a probléma analitikus megoldásához. A numerikus eredmények validálása azt az eredményt mutatja, hogy az áramlási változók idő- és helybeli változása hasonlított az analitikus megoldáséhoz, azonban a nagy gradiensek (éles frontok) mentén oszcilláció lépett fel, amely a valós fizikai esetekben nem figyelhető meg (3.3.a ábra).



3.3. ábra. A „shock tube” probléma analitikus és MacCormack módszerrel nyert megoldása a sűrűség esetében a) TVD nélkül, b) TVD-vel.

Az oszcillációk megjelenése az éles frontoknál jellemző minden olyan numerikus módszerre, amely másod- vagy magasabb rendű. Ezt a jelenséget Godunov bizonyította először [60]. Az oszcillációk kiküszöbölésére több módszert is kifejlesztettek. A következőkben a Total Variation Diminishing (TVD) technikát mutatom be, amelyet Harten dolgozott ki [61]. A technika ismertetéséhez vegyünk példaként a 3.21. egyenlettel leírt nemlineáris megmaradási egyenletet.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (3.21)$$

ahol u egy változó, $f(u)$ ennek a változónak valamilyen függvénye, t és x rendre az idő- és térváltozók.

Egy adott időpillanatbeli total variation-nek (TV), vagy magyarul összes változásnak nevezzük a 3.22. egyenletben definiált integrált.

$$TV = \int \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| dx \quad (3.22)$$

Fizikailag akkor elfogadható a numerikus megoldás, ha a TV nem növekszik az idővel [62]. A 3.22. egyenlet diszkrétizált alakját a 3.23. egyenlettel adhatjuk meg.

$$TV(u) = \sum_i |u_{i+1} - u_i| \quad (3.23)$$

ahol u_{i+1} és u_i az u változó értékei az $i+1$. és az i . helykoordinátában.

Az összes változás tehát nem növekedhet az idővel, ezt fejezi ki a 3.24. egyenlet.

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad (3.24)$$

A 3.24. egyenletbeli kritériumot teljesítő megoldásokat nevezi Harten TVNI-nek, azaz Total Variation Non-Increasing-nek [61], és ezt a tulajdonságot biztosító módszereket TVD-nek, azaz Total Variation Diminishingnek hívjuk. A másodrendű és afölötti pontosságú numerikus módszerek esetében a TVD feltétel teljesülése érdekében az alap numerikus módszerbe egy korrekciós lépést kell beépíteni.

Egy másik gyakori numerikus hiba akkor lép fel az áramlási szimulációk esetében, ha a kilépő peremfeltételeket nem megfelelően definiáljuk. Gázok esetében a konstans nyomáspere alkalmazása kompressziós és expanziós hullámok visszaverődését okozza, amelyek fizikailag nem realiztikusak. Az ezeket a jelenségeket elkerülő peremfeltételeket non-reflektív peremfeltételnek nevezik, melynek elméleti módszertanát Thompson írta le [63]. A kompresszibilis áramlás számítása esetén a fix nyomás kilépő peremfeltételnek köszönhetően az áramlási térben képződő hullámok visszaverődnek a peremről és emiatt nem tud kialakulni stacionárius áramlás a számítás során. A non-reflektív perem segít a hullámok kivezetésében a peremeken keresztül megszüntetve ezáltal a visszaverődést és ezek hatását. Ez történik a gyakorlatban fizikailag is amikor egy a keresztmetszet mentén nem homogén áramlás elhagyja pl. a csövet. Ez fizikailag a nagy átmérőjű csövek kilépő felületén figyelhető meg jól, hogy a teljes keresztmetszetben nem nulla vagy konstans a nyomás értéke, hanem pontonként változik.

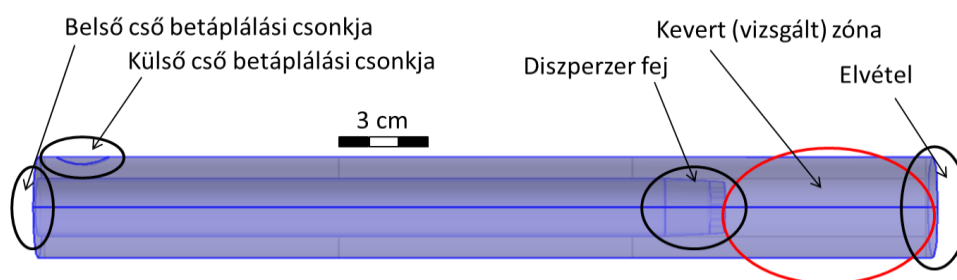
Esettanulmányaim egy részében a numerikus módszert kiegészítettük a TVD tulajdonságot biztosító taggal, valamint a kilépő peremfeltételt non-reflektív peremként definiáltuk, adaptálva Thompson módszerét. Az adszorpciós gáztisztító esetben például a megoldás stabilitása nagyrészt ezeknek a speciális kiegészítéseknek köszönhető.

3.6. Biomassza elgázosító reaktor

Az egyik esettanulmányban egy laboratóriumi méretű, kétlépéses, cellulózt pirolizáló és elgázosító reaktorral foglalkoztam. A kísérleti berendezés a vuhani Huazhong University of Science and Technology (Kína) „State Key Laboratory of Coal Combustion” laboratóriumában működik. A reaktor szerkezeti rajza alapján készítettem el a berendezés CFD modelljének geometriáját COMSOL Multiphysics-ben, amellyel tartózkodási idő analízisen alapuló hidrodinamikai vizsgálatokat végeztem. Az esettanulmány eredményeit és részletesebb leírását a 4.1. fejezet ismerteti.

3.7. Többfuratos jetkeverő

A jetkeverő esettanulmányához készített laboratóriumi eszköz egy 30 cm hosszú és 3,44 cm átmérőjű, valamint benne egy 7 cm-rel rövidebb, 1,78 cm átmérőjű átlátszó műanyag csőből áll. A fizikai eszköz alapján, a keveredés vizsgálatához készített CFD modell geometriáját a 3.4. ábra mutatja.



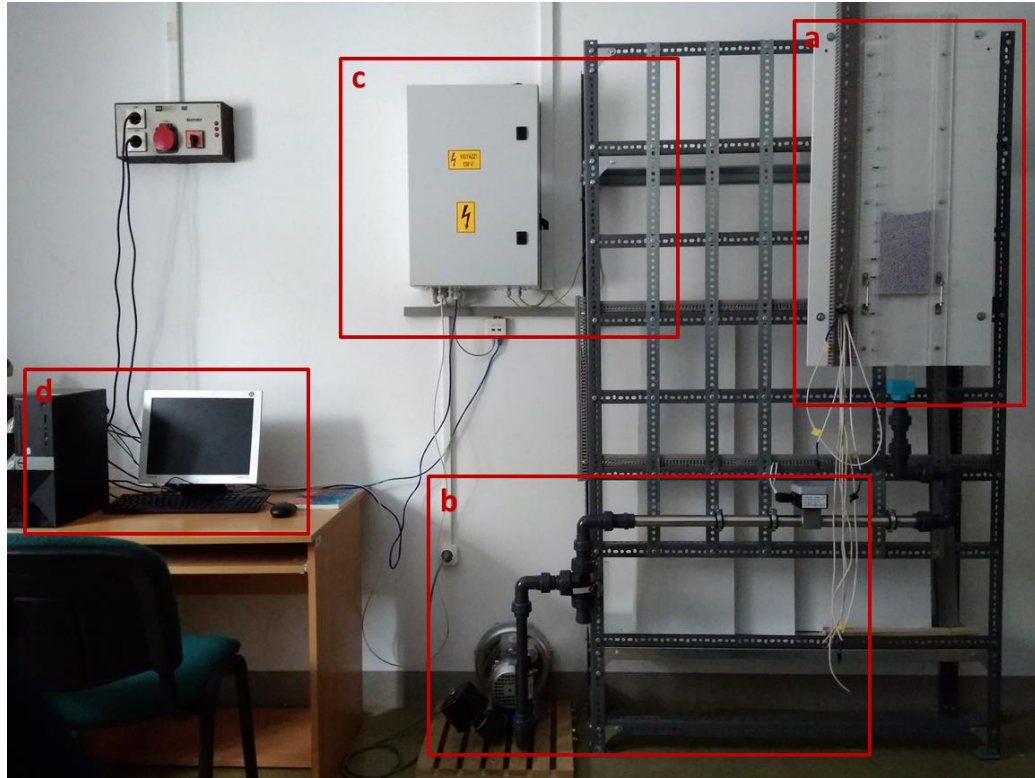
3.4. ábra. A jetkeverő eszköz geometriai modellje a funkcionális részek feltüntetésével [64].

A belső cső végére illeszthető a 2 cm hosszúságú többfuratos szórófej, amelyet többféle konstrukcióban készítettünk el 3D nyomtató segítségével. A jetkeverő eszköz célja, hogy a két bemeneten (külső és belső csövön) bevezetett

áram a többfuratos szórófejen átjutva minél nagyobb mértékben összekeveredjen. A mérőberendezés átlátszó fala lehetőséget teremt tartózkodási idő vizsgálat elvégzésére videofelvétel alapján.

3.8.Fluidizációs cella

A szimulációs eredmények kísérleti validálásához egy fluidizációs berendezést építettünk. A kvázi-kétdimenziós laboratóriumi méretű fluidágy légterének befoglaló méretei 15 cm x 95 cm x 1,5 cm. A berendezés előlapja és falai átlátszó plexi panelekből állnak, benne 11000 db 3,5 mm átmérőjű, egyenként 0,067 g tömegű alumínium golyót helyeztünk el. A gázeloszlást segítő fémrácsot a légbefúvó bevezetése fölött 20 cm-re építettük be. A berendezés oldalán 5-10 cm-enként, összesen 14 db relatív és abszolút Freescale MPX2010-es típusú nyomásszenzornak alakítottunk ki csatlakozási helyet. A fluidágyat egy frekvenciaváltós fúvó által biztosított gázáram hozza mozgásba, amely után egy Hönzsch TA-Di/U10a típusú áramlásmérőt csatlakoztattunk. A belépő csomak a fluidágy szélességének középső harmadában helyezkedik el. A sebesség- és nyomásadatokat egy Advantech gyártmányú ADAM-5000L/TCP típusú adatgyűjtő és irányító egység segítségével nyerjük ki. A berendezés a Pannon Egyetem Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék laborjában található (3.5. ábra).



3.5. ábra. Laboratóriumi méretű kvázi-kétdimenziós fluidizációs berendezés. a) fluidágy töltettel és a nyomá szenzorokkal, b) légbefúvó az áramlásmérővel, c) adatgyűjtő és irányító egységek, d) adatgyűjtő számítógép

A mérőberendezés célja a fluidizáció leírására használt modellek validálása. A cél eléréséhez a berendezés része egy nagysebességű kamera is. Az alkalmazott Optronics CL600x2 kamerának többféle beállítása lehetséges. A fluidizációs folyamat validációja kapcsán másodpercenként 500 db 1280x1024 képpontból álló felvételt rögzítettünk. A felvételeket a kamera egy adatgyűjtő számítógép felé továbbítja.

A mérőrendszer használatával a fluidizációs ágy szemcséinek helyzetéről és a nyomásviszonyairól nyerhetünk információt. A nagysebességű kamera felvételek alapján a szemcsék mozgását lehet elemezni, amely adatot szolgáltat a matematikai modell által nyert szimulációs eredményekkel való összehasonlításra. A szemcsék mozgási útvonalának detektálásához a felvételeket felhasználva képfeldolgozási utómunkálatokat kell végezni, amelyhez bármilyen alkalmas szoftvert (pl. MATLAB-ot) alkalmazhatunk.

A képfeldolgozáshoz a MATLAB-ban először be kell tölteni az elemzendő képet, majd alakfelismerő függvény segítségével detektálni a vizsgált

részecskéket. A részecskék középpontját egy újabb függvény segítségével lehet kinyerni. Ezeket a lépéseket a többi képkockával hasonlóképpen megismétljük. Olyan képsorozatot kell választani, amelyen egy kiválasztott szemcse jól követhető. A kinyert pozícióadatokról elmozdulást és sebességet is számíthatunk a képrögzítések között eltelt idő ismeretében, amely adatokat a szimulációs eredményekkel össze lehet hasonlítani.

3.9. Szedimentációs oszlop

A szilárd részecske folyadékban való ülepedését leíró modell kísérleti validálásához használt berendezés egy 1 m magas, 10 cm átmérőjű átlátszó műanyag cső vízzel vagy más newtoni folyadékkal töltve. Körülbelül 3 mm átmérőjű szilárd szemcséket a folyadékoszlop felszínének közepére helyezve, és egyesével elengedve, ülepedésüket kamerával rögzítve képfeldolgozáson alapuló mozgáselemzés válik lehetővé. A sebességfluktuációk mérési adatai jó alapot szolgáltatnak a szimulációs kísérlet validálásához. A mérések a University College Cork Folyamat- és Vegyészmérnöki Tanszékének laboratóriumában készültek. Az ülepedéssel kapcsolatos modellezési és szimulációs eredményeiről a 4.5. fejezet esettanulmányában számolok be.

4. Esettanulmányok és eredmények

Ebben a fejezetben a korábban részletezett módszerek alkalmazását, és az eredményeket mutatom be. Az alfejezetek a témában megjelent publikációim gondolatmenetét követik. Az esettanulmányok bemutatása egy rövid összefoglalóval kezdődik, amelyben elhelyezem a témát és áttekintést adok a konkrét esethez szorosan kapcsolódó tudományos eredményekről, elkerülve azokat az általános ismertetéseket, amelyekkel a 2. és 3. fejezetben már foglalkoztam. Az esettanulmányok mindegyike rövid összefoglalással zárul, melyekben sok esetben további tervek, ötletek is szerepelnek.

Az első esettanulmányban a hagyományos CFD modellezést, és ennek kevésbé számításigényes alternatívájaként a cellás modellek használatát mutatom be. A vizsgált berendezés ebben az esetben egy összetett geometriával rendelkező biomassza elgázosító reaktor. A cellás modell segítségével egy tartózkodási idő analízist végeztem a reaktor hidrodinamikai tulajdonságainak megismerése céljából. A második esettanulmány keverő berendezések teljesítményének értékelésére kidolgozott módszertant ismertet egy többfuratos jetkeverő példáján keresztül. A bemutatott módszer szemcsekövetéses vizsgálatok adatainak elemzésén alapszik. Az utolsó három esettanulmány a direkt numerikus szimulációs módszer alkalmazására mutat példákat. A módszert a fluidizáció, adszorpció és szedimentáció részecske szintű folyamatainak modellezésére és szimulációjára használtam.

4.1.Biomassza elgázosító reaktor hidrodinamikai modellezése

A biomassza hasznosítás környezetvédelmileg fontos művelet, mivel megújuló energiát vagy új termékeket állít elő. Napjainkban a fosszilis előforrások kiapadóban vannak, így az alternatív megoldások kutatása népszerű és fontos tématerület. Biomassza alatt számos különféle természetes anyagot értünk, például fáradt olaj vagy vízi növények. A biomassza eredete lehet faipari, mezőgazdasági, vízi és állati hulladék. A fás szárúak alkotta biomassza főként cellulózból, hemicellulózból és ligninből épül fel. Ezek közül is a cellulóz a fő komponens, amely egy D-glükóz egységeket tartalmazó poliszacharid. A biomassza konverziója végbemehet biokémiai, fiziko-kémiai és termokémiai utakon. Biokémiai konverzió során a biomassza molekuláit enzimek vagy baktériumok bontják le kisebb molekulákra. Ez a folyamat lassabb, mint a termokémiai konverzió, ellenben nem igényel annyi energia-befektetést. A fiziko-kémiai út alkalmazása során bizonyos biomasszákból, például napraforgó vagy repcemagokból növényi olajat sajtolnak, vagy a biomasszát pelletálják sűrűség növelés, alak- és méretegységesítés érdekében [65]. A pelletálás előkészítője lehet a további, termokémiai úton történő biomassza-hasznosításnak is. A biokémiai, fiziko-kémiai és termokémiai feldolgozási módok közül az esettanulmányban egy termokémiai folyamatoknak helyet adó reaktorral végzett vizsgálataimat mutatom be. A fő termokémiai folyamatok a pirolízis, az égés, az elgázosítás, a hidrotermális cseppfolyósítás és a hidrotermális karbonizálás [66]. Ezek közül a pirolízis és az elgázosítás folyamán lehet hatékonyan jóminőségű szintézisgázt vagy folyékony üzemanyagot előállítani [67].

A biomassza elgázosítás magas hőmérsékleten egy összetett folyamat, amely két gyakran átlapoló szakaszból áll. A pirolízis szakasz során relatíve alacsony hőmérsékleten felszabadulnak az illékony komponensek, amelyek a magasabb hőmérsékleten végbemenő elgázosítás szakasza során átalakulnak [68]. Kétlépéses pirolizáló/elgázosító rendszereket, melyben a felső szakaszban a pirolízis, alsó szakaszában az elgázosítás megy végbe, könnyebb tanulmányozni, szimulálni, valamint a gázfejlődést és a gázkomponensek összetételét és arányát számítani [69]. Az elgázosítás során a széntartalmú alapanyag termikus lebomlása megy végbe egy kívülről biztosított oxidáló ágens jelenlétében. A levegő, az

oxigén és a vízgőz a leggyakoribb ágensek, mindnek megvan a maga előnye. A vizsgált reaktorban használt vízgőz ágens alkalmazásának az az előnye, hogy oxidálás mellett a gázátalakító folyamatokat is elősegíti [70]. A katalizátor is fontos szerepet játszik az elgázosítás folyamatában, segítségével a folyamat gyorsabban átjut az energiagáton. Az esettanulmányban vizsgált kétlépcsés állóágyas reaktorban $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ a katalizátor.

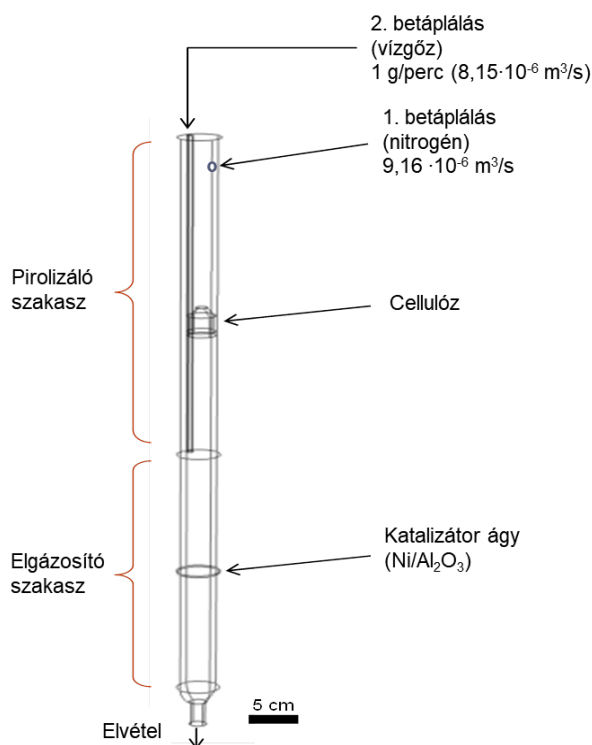
A reaktorban lejátszódó reakciók mechanizmusát kísérletek és mérések által fel lehet tárni, azonban a reaktor áramlási, hidrodinamikai viszonyai mérésekkel nehezen követhetők nyomon. A reaktor hidrodinamikai tulajdonságainak megismerése szükséges és fontos követelmény a berendezés geometriájának tervezésekor. Elgázosító reaktorok esetében is gyakran használják a numerikus áramlástani (CFD) módszereket az áramlási tulajdonságok meghatározására. Gómez-Barea és Leckner [71] csakúgy mint Sharma és munkatársai [72] tanulmányaikban CFD szimulációt használtak biomassa elgázosító reaktorok vizsgálata esetében. Kiemelték, hogy a számítógépes szimulációk használatának egyik fő előnye, hogy a berendezések általuk költséghatékonyan vizsgálhatók és optimalizálhatók. A reaktortér hidrodinamikájának megismeréséhez segítséget nyújthat a rendszer tartózkodási idő eloszlásának a meghatározása is. A berendezések RTD görbéjét szimulációs úton is meghatározhatjuk úgy, hogy a bemeneten vagy bemeneteken beinjektált jelzőanyag áramlásának modellezésére és szimulációjára a szokásos áramlási egyenleteket kiegészítjük a jelzőanyag koncentráció idő- és térbeli változását leíró mérlegegyenlettel, majd a modell alkalmazásával nyomon követjük, hogy a jelzőanyag időben hogyan távozik a kilépő peremen keresztül. A 3.3. alfejezetben bemutatott tartózkodási idő analízis gyakori vizsgálati módszer, és jelentős szerepet kap a jelen tanulmányban is.

A bonyolultabb geometriájú berendezések nem írhatók le ideális áramlási modellekkel (tökéletesen kevert üst és dugóáramú cső modelljei), azonban ezek kombinációjával, az úgynevezett cellás modellek alkalmazásával modellezhetjük a hidrodinamikai viselkedést. A cellás modellezésen alapuló szimulációk előnye a CFD szimulációkhoz képest a kisebb számítási igény. Kong és munkatársai elgázosító reaktor modellezésére használtak cellás modellt [58].

Az esettanulmányban bemutatott elgázosító reaktor cellás modelljét is elkészítettük MATLAB környezetben, és a COMSOL Multiphysics programcsomaggal készített CFD modellből nyert eredményekkel hasonlítottam össze. Az eredmények azt mutatják, hogy a létrehozott modellekkel egy eszközt tudunk nyújtani a bonyolultabb reaktorterek belső áramlási viszonyainak vizsgálatához. Az ismertetett módszerek a konkrét eseten túl más reaktorok tervezéséhez is alkalmazhatóak.

Módszerek és eszközök

Az esettanulmányban a 3.9. alfejezetben bemutatott laboratóriumi méretű, felülről lefelé áramlású, állóágyas katalizátorral rendelkező kétlépéses pirolizáló és elgázosító reaktort modelleztem a reaktortér hidrodinamikájának feltárása érdekében. A reaktortérben végbemenő kémiai reakciókkal nem foglalkoztam, azokról Zou és munkatársainak cikkében található részletes információ [73]. A 4.1. ábra mutatja a reaktor geometriai modelljét a bemenetek, a kimenet, a cellulóztároló edény, a katalizátor ágy és az egyes funkciós szakaszok megjelölésével.



4.1. ábra. A reaktor szerkezeti rajza.

A nitrogént mint inert gázt a reaktor felső részének oldalán vezetjük be $9,16 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$ térfogatárammal. A nyersanyag – esetünkben vegytiszta, Sigma-Aldrich gyártmányú, $20 \text{ }\mu\text{m}$ -es kristályporból álló cellulóz – az ábrán jelölt tartóban van elhelyezve. A pirolízis folyamata a reaktortest felső szakaszában megy végbe. Az elgázosításhoz szükséges oxidáló ágens, esetünkben vízgőz $8,15 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$ térfogatárammal egy bemerülő cső segítségével a reaktortest alsó felében kerül bevezetésre. A vízgőz így az elgázosító szakasz kezdetén tud reakcióba lépni a pirolízistermékekkel. A CFD modellben a reaktor teljes térfogatára $800 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékletet definiáltam a kísérleti berendezés valós működésének megfelelően. Az izoterm körülmény miatt a modellegyenletekhez nem szükséges energiaegyenletet adni. 15 w/w %-os Ni tartalmú $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ katalizátor a jelölt helyen fixágában van elhelyezve. A reaktorból távozó gáz összetétele a vízgőz térfogatáramának változtatásával befolyásolható [73].

A reaktor CFD modelljét COMSOL Multiphysics-ben készítettem el. Az összes vizsgált esetben a Reynolds szám a turbulens határérték alatt maradt, ezért a 4.1-4.2. egyenletekkel megadott stationárius lamináris áramlási modellt használtam.

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.1)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p \mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu(\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}] + \mathbf{F} \quad (4.2)$$

ahol ρ a sűrűség, $\mathbf{u}$ a sebességvektor, p a nyomás, μ a dinamikai viszkozitás és $\mathbf{F}$ az áramlást befolyásoló egyéb erők.

A bemeneteken peremfeltételként a nitrogén és a vízgőz térfogatáramát adtam meg, a kimeneti peremen pedig konstans nyomást definiáltam a visszaáramlás megakadályozásával. Az összes többi peremen a nem-csúszó fal peremfeltételt állítottam be.

A tanulmányban az elgázosító reaktor hidrodinamikai viselkedését tartózkodási idő eloszlásfüggvény analízissel vizsgáltam. Ehhez szükség volt az eddig megadott egyenletek mellé a jelzőanyagra vonatkozó komponensmérleget is felvenni (4.3. egyenlet).

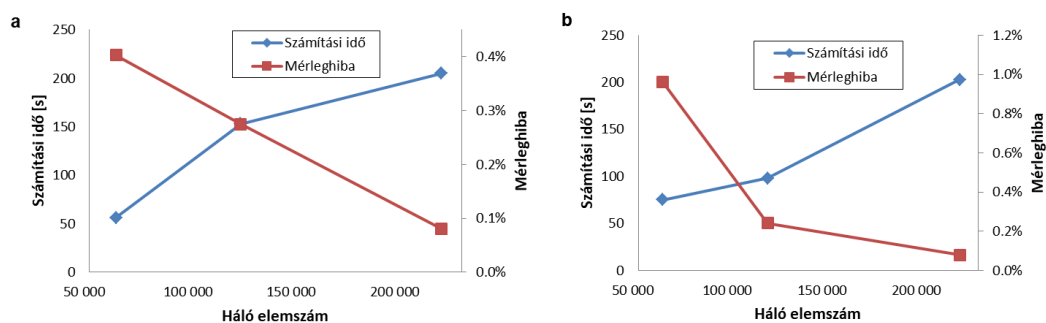
$$\nabla \cdot (-D_i \nabla C_i) + \mathbf{u} \cdot \nabla C_i = R_i \quad (4.3)$$

ahol D_i az i komponens diffúziós állandója, ∇C_i az i komponens koncentráció gradiense és R_i az i komponens forrása, amely esetünkben jelenleg 0, de a későbbi alkalmazásokban akár a kémiai reakció vagy más forrás beilleszthető.

A falak mentén a megadott peremfeltétel nem enged meg komponens áramlást. Impulzusszerű jelzőanyag injektálást alkalmaztam mindkét bemeneten. A berendezés kimenetén számítottam a felületre átlagolt kilépő koncentrációt az idő függvényében, ennek eredménye lett a tartózkodási idő eloszlás görbe.

Eredmények és értékelés

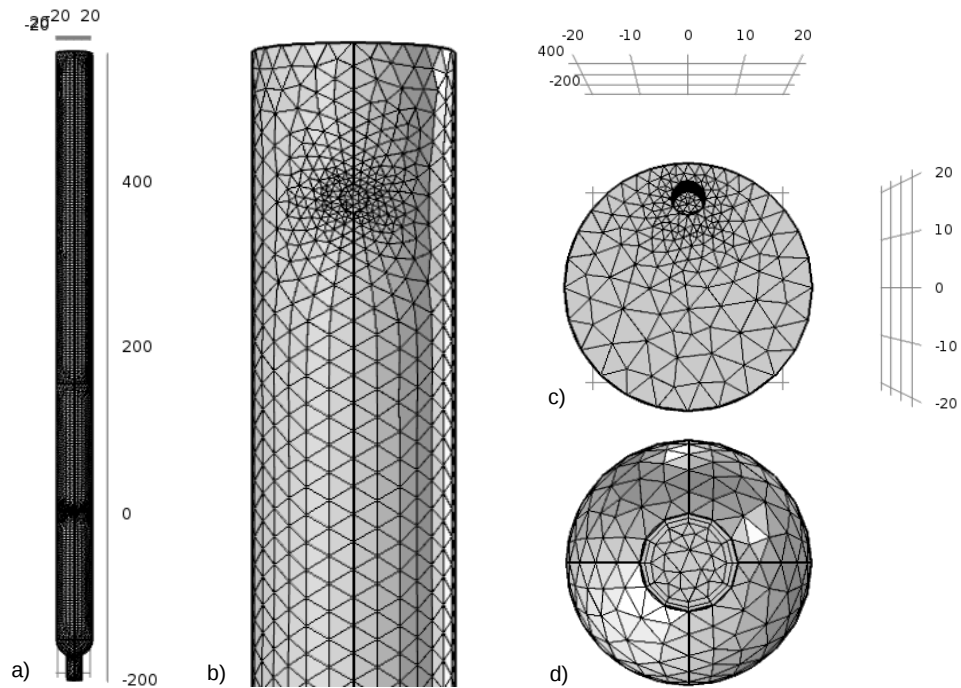
A 3.2. fejezetben ismertetett hálófüggetlenségi vizsgálatot alkalmaztam a CFD szimuláció számára megfelelő számítási háló kiválasztása érdekében. A reaktor 3D-s geometriájához három különböző felbontású számítási hálót generáltam. A hálógenerálás alapjául a megadott maximális hálóelem méret szolgált, amelyet a legdurvább felbontás esetében 11,9 mm-nek, a közepesen durva felbontás esetében 7,74 mm-nek, míg a legfinomabb felbontás esetében 5,96 mm-nek adtam meg. Mérleghibát számítottam mind az impulzusmérleg, mind a komponensmérleg esetében (4.2. ábra) a belépő és kilépő áramokat figyelembe véve.



4.2. ábra. A hálóelemszám hatása a futási időre (kék) és a mérleghibákra (piros)
a) impulzusmérleg és b) komponensmérleg esetében.

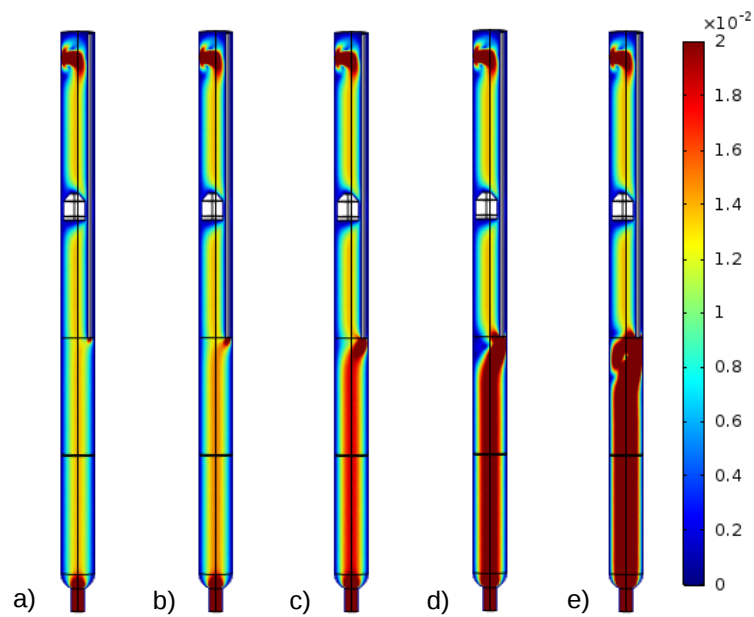
A számításokat Dell Optiplex 790-es, 16 GB memóriával rendelkező személyi számítógépen futtattam. Mindkét mérleg esetében a várakozásnak megfelelően látszik, hogy egyre finomabb számítási hálót alkalmazva egyre kisebb a mérleghiba, ugyanakkor egyre nő a számítási idő. A későbbiekben a

vizsgálatban alkalmazott háromféle számítási háló közül a legfinomabbat használtam, mert ez elfogadható számítási időigény mellett megfelelően alacsony hibaértéket generál. A számításaimhoz használandó háló tehát 220121 elemből áll, amely finomabb felosztású perem rétegeket (boundary layers) is tartalmaz (4.3. ábra).

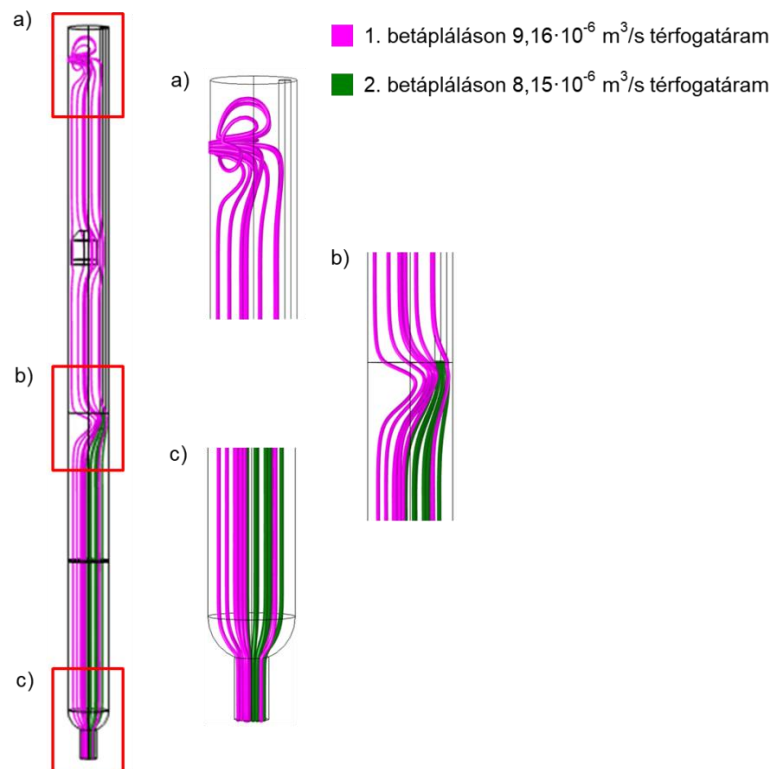


4.3. ábra. Az elgázosító reaktor modellezéséhez használt számítási háló. a) a teljes geometria, b) az első bemenet (Inlet 1) és környéke, c) a második bemenet (Inlet 2) és környéke, d) a kimenet és környéke.

Az áramlási mezőt különböző vízgőz tömegáramok (Inlet 2: 0,01 g/perc, 0,02 g/perc, 0,05 g/perc, 0,1 g/perc, 0,2 g/perc) beállításával számítottam. A stacionárius megoldások a 4.4. ábrán lévő sebességi mezőket eredményezték. A sebességi mezőn alapul az áramvonalakat mutató 4.5. ábra, amely az áramlás fő irányát mutatja, és a holttereket is szemlélteti.

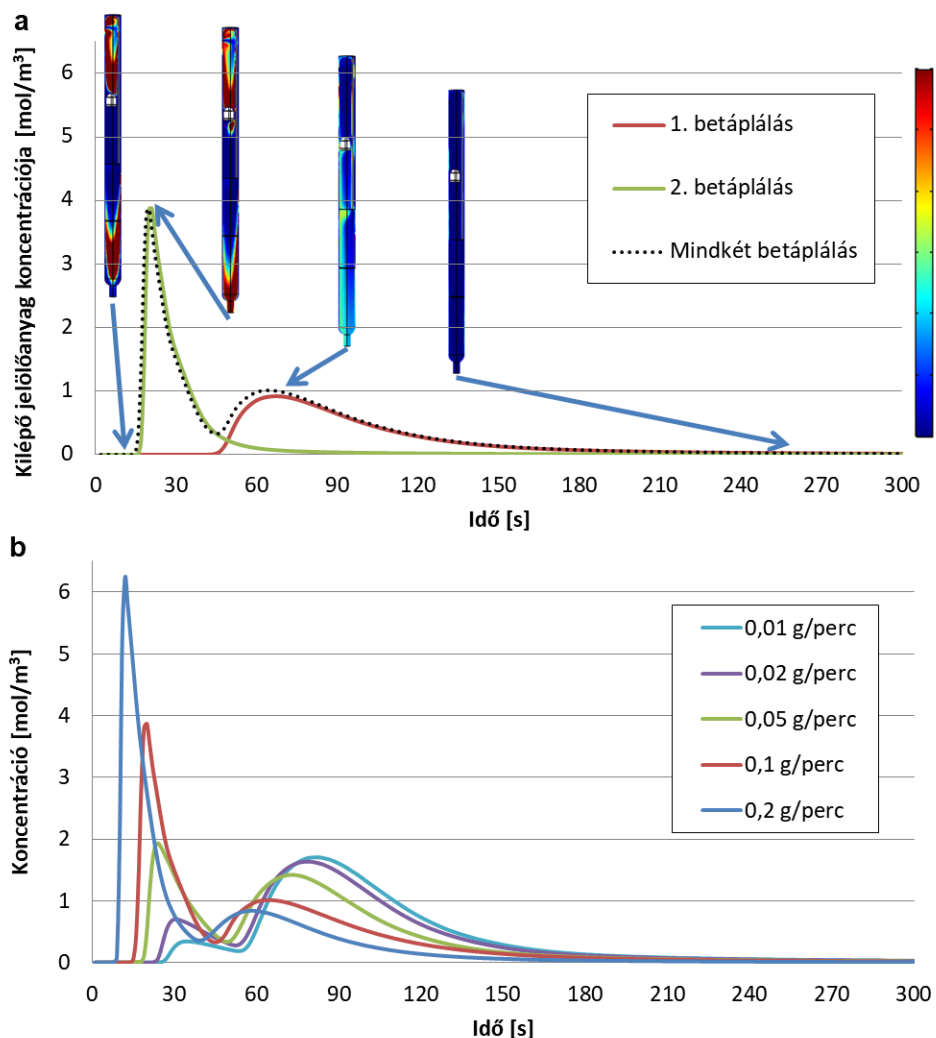


4.4. ábra. Az elgázosító reaktor sebességmezője [m/s] hosszanti keresztmetszetben a különböző tömegáramú vízgőz bemenet (Inlet 2) esetén. a) 0,01 g/perc, b) 0,02 g/perc, c) 0,05 g/perc, d) 0,1 g/perc, e) 0,2 g/perc



4.5. ábra. Az elgázosító reaktorban kialakuló áramvonalak 0,1 g/perc vízgőzbemenet esetében. A rózsaszín vonalak a nitrogéngáz áramvonalait jelölik, a zöldek a vízgőzét. a) az 1. betáplálás és környéke, b) a 2. betáplálás és környéke, c) a kimenet és környéke.

Az előzetesen kiszámított stacionárius impulzusmérleget felhasználva a modell segítségével komponensmérleget számítottam a bemeneteken injektált jelzőanyag áramlásának követésére. Az impulzusszerű Dirac delta függvényt a szimulációs programban téglalap függvénnyel valósítottam meg, melynek során 100 mol/m^3 koncentrációjú jelölőanyagot injektáltam 1 s-on keresztül mindkét bemeneten (4.6.a ábrán fekete pontokkal jelölve), csak az 1. betápláláson (piros vonal), vagy csak a 2. betápláláson (zöld vonal). A 4.6. ábra a) részében a jellemző változások időpontjában (13 s, 18 s, 73 s és 260 s-nál) a reaktor hossz menti koncentrációprofilját is beszúrтам.



4.6. ábra. A vizsgált rendszer válaszfüggvénye az impulzus bemenetre a) 0,1 g/perc vízgőz bemenet esetén, b) különböző vízgőz (2. betáplálás) tömegáramok esetében.

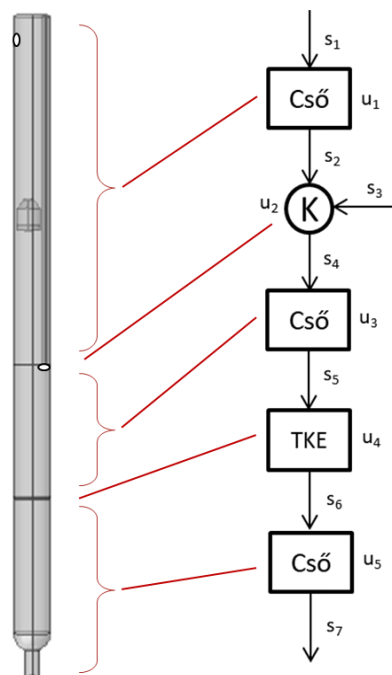
Az első csúcs mutatja, hogy a 2. betáplálásból (bemerülő cső, lásd 4.1. ábra) származó jelölőanyag nagy koncentrációban rövid idő alatt eléri a kimenetet és távozik a rendszerből, míg az 1. betáplálásból (a reaktortest felső részén lévő) származó jelölőanyag lassabban éri el a kimenetet, és később távozik a rendszerből. A H_2 termelést befolyásolja az elgázosító ágens mennyisége a reaktor elgázosító részében [73], ezért különböző vízgőz tömegáramokkal is lefuttattam a jelzőanyag numerikus bevezetésével végzett szimulációs kísérleteket. A 4.6.b ábrán a különböző vízgőzáramok melletti, kimeneten detektált koncentrációgörbéket láthatjuk. Az első koncentrációcsúcs a vízgőz tömegáramának növelésével egyenes arányban növekszik, a második koncentrációcsúcs pedig fordítottan arányos vele (4.6.b ábra). A 3.3. fejezetben ismertetett 3.8. egyenlet alapján kiszámítottam minden esethez az átlagos tartózkodási időt, amely a vízgőzáram növelésével fordítottan arányos (4.1. táblázat).

4.1. táblázat. Átlagos tartózkodási idők az elgázosító ágens különböző sebességű betáplálása esetén.

A reaktortest teljes térfogata [m ³]	A nitrogén (1. betáplálás) térfogatárama [m ³ /s]	A vízgőz (2. betáplálás) tömegárama [g/perc]	A vízgőz (2. betáplálás) térfogatárama (tömegáramból átszámítva) [m ³ /s]	Átlagos tartózkodási idő [s]
1,02E-03	9,16E-06	0,01	8,15E-07	102,06
		0,02	1,63E-06	95,17
		0,05	4,07E-06	79,19
		0,1	8,15E-06	64,00
		0,2	1,63E-05	43,83

A cellás modellezési megközelítés szerint egy tetszőleges hidrodinamikájú berendezés modellje felírható dugóáramú cső (Cső), tökéletesen kevert egységek (TKE), keverők (K) és elosztók (E) kombinációjával. Az utóbbi kettő elemnek funkcionális szerepe van, de térfogatot nem foglal. A cellák közötti kapcsolatot kapcsolati mátrix-szal adjuk meg, melyben az oszlopok a cellák, a sorok az

áramok. -1 a kimenő áramot, 1 a bemenő áramot jelzi, 0 pedig, hogy az adott cellát nem érinti az adott áram. Az elgázosító reaktor cellás modelljét a 4.7. ábra mutatja, jelölve a CFD modellnek való megfeleltetéseket. A kapcsolati mátrixot a 4.2. táblázatban adtam meg.



4.7. ábra. A reaktor cellás modellje az u_1 - u_5 cellák és s_1 - s_7 áramok feltüntetésével.

4.2. táblázat. Az elgázosító reaktorra felírt cellás modell kapcsolati mátrixa.

	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5
s_1	1	0	0	0	0
s_2	-1	1	0	0	0
s_3	0	1	0	0	0
s_4	0	-1	1	0	0
s_5	0	0	-1	1	0
s_6	0	0	0	-1	1
s_7	0	0	0	0	-1

Az ideális áramlású csöveket tökéletesen kevert egységek kaszkádjaként modelleztem, a kaszkádba kötött tökéletesen kevert egységek száma tehát egy modellezési paraméter. Kevés kaszkádelem nem közelíti megfelelő mértékben az ideális áramlású csőre jellemző hidrodinamikát. A vizsgálatokban kezdetben 10 kaszkád elemet használtam, és nem tapasztaltam minőségi javulást a

kaszkádelemszám növelésével sem, így az elemszám paramétert a továbbiakban nem változtattam.

A reaktor pirolizáló szakaszát ideális áramlású csőként modelleztem. A vízgőz bemenet miatt szükség volt egy keverőcellára. A katalizátorágyat tökéletesen kevert egységnek tekintettem, a reaktor többi részét pedig ideális áramlású cső cellás modelljeivel közelítettem. A térfogattal rendelkező cellákhoz a valós geometriának megfelelő értékeket rendeltem, amelyek a teljes térfogathoz vett arányokat tekintve 53,26%, 22%, 0,28%, 24,46%-nak adódtak rendre. A cellás modell kevert egységeit leíró közönséges differenciálegyenleteket explicit Euler módszerrel oldottam meg 0,2 s-os lépésközt alkalmazva. A 4.8. ábra mutatja az impulzus bemenetre adott koncentráció válaszgörbéket a CFD és cellás modell alkalmazása esetében, 0,1 g/perces vízgőzáram mellett. Az egyezést jónak találtuk, de a különbség számszerűsítése érdekében abszolút és négyzetes hibát is számítottunk a kétféle modellből kapott eredményből az alábbi 4.4. és 4.5. egyenletek alapján.

$$Err_{abs} = \sum_{i=1}^t abs(c_{cellás, i} - c_{CFD, i}) \quad (4.4)$$

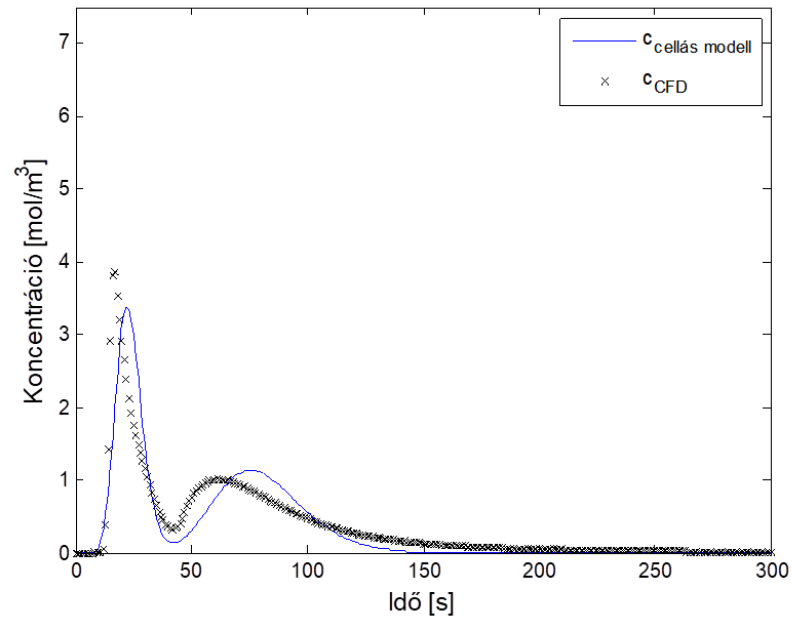
$$Err_{négyzetes} = \sum_{i=1}^t (c_{cellás, i} - c_{CFD, i})^2 \quad (4.5)$$

Kísérletképpen egy optimalizáló algoritmus, a Particle Swarm Optimization (PSO, [74]) segítségével meghatároztam azokat a térfogati paramétereket, amellyel a 4.6. egyenlettel leírt célfüggvény eléri a minimumát.

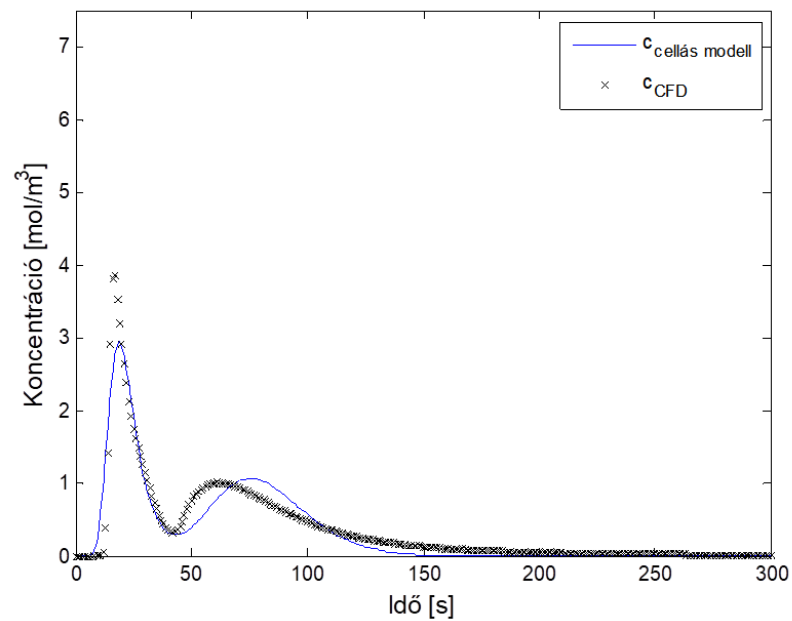
$$\min \sum (c_{cellás\ modell}(t) - c_{CFD}(t))^2 \quad (4.6)$$

A célfüggvény a rendelkezésre álló időpillanatokban kiszámítja a két modell és szimuláció által kapott értékek négyzetes különbségét, majd az értékeket összegzi, hogy a teljes időskálára kapjunk egyetlen olyan számot, amely a két görbe egymástól való eltérését fejezi ki, és amelyet tekintve a célunk az, hogy ez minél kisebb legyen. A 4.8. ábra az optimalizált cellás modellből (kék vonal) és és az eredeti CFD modellből (fekete csillag) nyert koncentrációgörbéket mutatja.

a $F_{\text{vizgőz}}=0.1$ g/perc, $N=10$, $dt=0.2$ s, $\text{error}_{\text{abs}}=46.4523$, $\text{error}_s=27.9649$



b $F_{\text{vizgőz}}=0.1$ g/perc, $N=10$, $dt=0.2$ s, $\text{error}_{\text{abs}}=33.3968$, $\text{error}_s=10.6902$



4.8. ábra. A CFD és cellás modell felhasználásával nyert koncentrációgörbék.

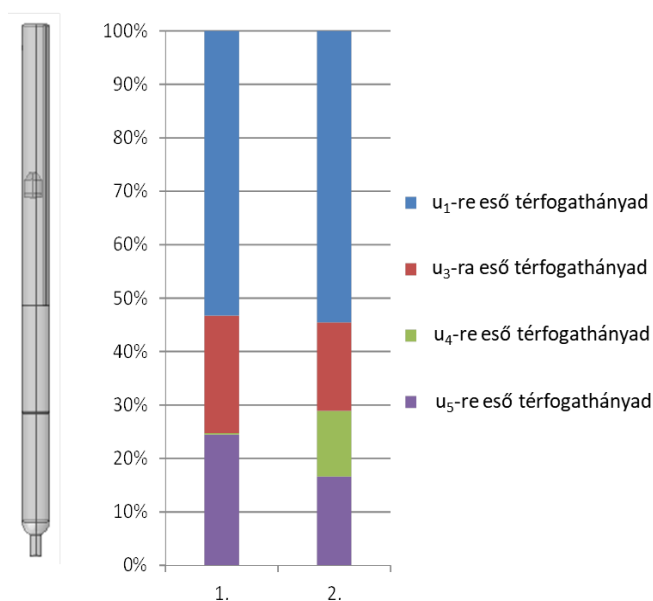
- a) a cellák térfogatparaméterét a valós geometria alapján határoztam meg,
- b) a térfogatparaméterek optimalizálási algoritmus alapján lettek meghatározva.

A kétféle paraméterválasztási stratégiával futtatott szimulációk eredményeit a 4.3. táblázatban foglaltam össze. A térfogatarányok változását szemlélteti a 4.9. ábra. Habár a hibaértékek csökkentek valamelyest, mivel az optimalizált modell

geometriai paraméterei jelentősen eltérnek a valóstól, ezért az optimalizált cellás modell további használatát elvetettem.

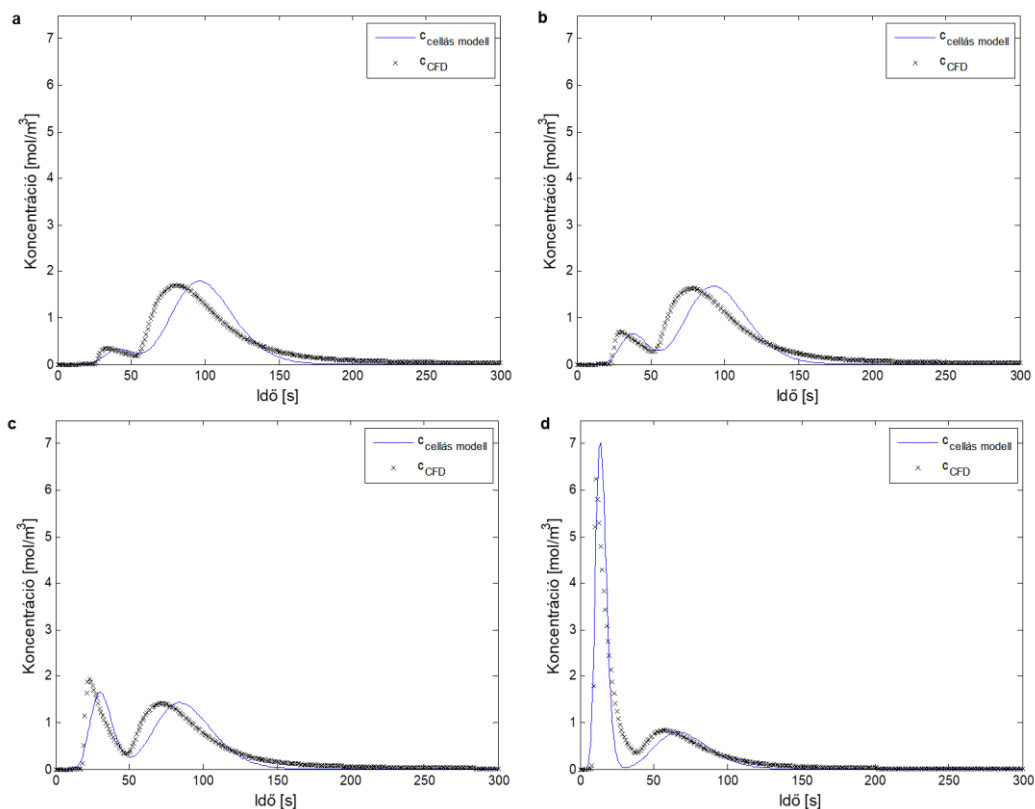
4.3. táblázat. Modellparaméterek és eredmények.

	A reaktor geometriai szekcióinak térfogathányadai	Optimalizált térfogathányadok
u_1-re eső térfogathányad	53,26%	60,08%
u_3-ra eső térfogathányad	22,00%	17,74%
u_4-re eső térfogathányad	0,28%	4,44%
u_5-re eső térfogathányad	24,46%	17,74%
Abszolút hiba	46,45	33,40
Négyzetes hiba	27,96	10,69



4.9. ábra. Az optimalizált paraméterek szerint az u_3 , u_4 és u_5 egységek térfogata közel egyforma (2.), amely nagyban eltér a valós reaktor geometriai szekcióinak térfogathányadaitól (1.).

A valós geometriát követő térfogati paramétereket alkalmazó cellás modell eredményét összehasonlítottam a CFD szimulációval kapott eredményekkel a többi vízgőz tömegáram mellett is, ezeket mutatja a 4.10. ábra. Ebben a négy esetben is láthatóan jó egyezést kaptunk, a számszerű összehasonlíthatóság érdekében az eltérést mutató hibaértékeket a 4.4. táblázatban foglalom össze.



4.10. ábra. A CFD modellel kapott koncentrációgörbék és a reaktor geometriájának megfelelő térfogati paramétereket használó cellás modellel nyert koncentrációgörbék a többi vizsgált vízgőz tömegáram esetében. a) 0,01 g/perc, b) 0,02 g/perc, c) 0,05 g/perc, d) 0,2 g/perc.

4.4. táblázat. Modellparaméterek és hibaértékek a további négy vízgőz áram esetében.

u₁-re eső térfogathányad	53,26%			
u₃-ra eső térfogathányad	22%			
u₄-re eső térfogathányad	0,28%			
u₅-re eső térfogathányad	24,46%			
A vízgőz tömegárama	0,01 g/perc	0,02 g/perc	0,05 g/perc	0,2 g/perc
Abszolút hiba	45,19	43,76	40,80	42,14
Négyzetes hiba	17,59	15,38	14,44	36,67

Összefoglalás

Ebben az esettanulmányban egy biomassa elgázosító reaktor hidrodinamikai viszonyait tártam fel. A készülékben kialakuló áramlási viszonyok meghatározásához egy CFD szoftvert használtam. A szimulációs vizsgálatokban a

kísérleti berendezésnek megfelelő geometriai és működtetési paramétereket alkalmaztam. A reaktor hidrodinamikai jellemzőit CFD szimuláció segítségével, tartózkodási idő eloszlás függvény analízissel vizsgáltam. Abból a célból, hogy meghatározzam a reaktor egyes szekcióinak jellemző hidrodinamikai karakterisztikáját, egy ideális áramlású egységekből és keverőcellákból felépített cellás modellel is közelítettem a reaktor működését. Az első lépésben az egyes cellák térfogatparaméterét a reaktor geometriájának megfelelően választottam meg, az álló katalizátorágyat tökéletesen kevert egységnek, a reaktor többi részét pedig ideális csőnek tekintettem. A kimeneten számított koncentrációértékeket összehasonlítottam a CFD szimuláció által nyert eredményekkel, és jó egyezést találtam. Az egyezést tovább javíthatjuk a cellás modell térfogati paramétereinek optimalizált megválasztásával, azonban a valóságtól nagyban eltérő térfogati arányokat kaptunk, emiatt az optimalizálást és az optimalizált paraméterek későbbi használatát elvetettük. Mind a CFD, mind a cellás modellel többféle vízgőz térfogatáram mellett vizsgáltam a reaktort. Ezek a különböző feltételek a gyakorlatban a termelt gázösszetételre is hatással vannak. Kínai partnereink ugyanezeket a paramétereket alkalmazták a valós rendszeren végzett mérésekben, ezért a hidrodinamikai esettanulmány gyakorlati jelentőséggel is bír. A kidolgozott modellek és az ismertetett módszerek alkalmasak a bemutatott biomassza elgázosító reaktor további vizsgálatára.

4.2. Többfuratos jetkeverő keverőteljesítményének jellemzése szemcsekövetésen alapuló kevertségi mérték alapján

Intenzív folyadék-folyadék keverésre gyakran van szükség a vegyiparban, például nagysebességű reakciók esetében a betáplált áramok összekeverésekor, hogy növeljük a konverziót és csökkentsük a mellékreakciók esélyét. A homogenizálás hatékonyságának jellemzésére kidolgoztam egy eljárást, amelyet ebben az esettanulmányban mutatok be. A vizsgált berendezés egy cső a csőben elrendezésű kétbemenetű eszköz, amely egy folyamatos üzemű reaktor betáplálási áramát készíti elő. A többfuratos szórófejet a belső cső végére helyezve az átáramló folyadék elkeveredik. Szemcsekövetéses vizsgálattal a két bemenetről indított, és a közös kimenetre érkező szemcsék pozíciója és eredete alapján állapítottam meg a keveredés fokát. A tanulmány célja néhány, fizikailag könnyen létrehozható furatos keverőfej-konstrukció összehasonlítása a keverési teljesítményük alapján, és a leghatékonyabban működő szórófej kiválasztása. A keveredés vizsgálatához egy CFD modellt hoztam létre, amelyet kísérletileg validáltunk.

Irodalmi bevezetés

Jet keverőknek nevezzük az olyan elvű keverőket, amelyek esetében egy szűkebb keresztmetszeten átkényszerítve a fluidum nagy sebességgel, sugárszerűen áramlik egy álló vagy mozgó közegbe, és ezzel keveredést idéz elő. Abban az esetben, ha a két fázis nem elegyedő, diszperzernak is nevezhető a szórófejes keverő. Diszperzereket gyakran alkalmaznak a vegyiparban, főleg erősen exoterm reakciók esetében. Bauer és Eigenberger gáz-folyadék buborékoztató oszlopreaktorban használt [12], Dautzenberg és Mukherjee pedig többféle reaktor folyamat intenzifikálásához alkalmazott diszperzert [76]. A többfuratos jet keverőket multijet keverőknek nevezzük. Ezek tovább fokozzák a sugáráram keverőhatását azáltal, hogy a sugáráram több helyről is érkezik. Egy reagens reaktortérbe injektálása jó módszer lehet a reakció szabályozására, így a termékminőségre is hatással lehetünk, valamint biztonsági szempontból is lényeges lehet. Kevert reaktorokban termikus elfutás megakadályozására is használnak jet keverőt az inhibitor reaktortérbe juttatásához. Ilyen rendszert

vizsgáltak Junchen-jiang és munkatársai [77]. Rahimi és Parvareh tartályokban tárolt nyersolaj keveréséhez használtak jet keverőt keverőlapátok alkalmazása mellett [78]. Vite-Martínez és munkatársai tanulmányukban egy kevert üstreaktorokban reagens injektáláshoz keresték az optimális helyet [79], Xue és munkatársai pedig dízel befecskendezéshez alkalmaztak sugárszerű betáplálást [80]. A diszperzereket hagyományos, kísérleti adatokon alapuló módszerekkel nehéz vizsgálni, mivel kísérleti adatok nem nagyon állnak rendelkezésre a vonatkozó irodalomban. A lehetséges mérési eljárásokhoz költséges mérőberendezés szükséges, például röntgen radiográfia, mint amelyet Nguyen és munkatársai használtak [81] vagy optikai sebességmérésre (particle image velocimetry, PIV) alkalmas lézeres mérőberendezés [82], amelyet például Zhang és munkatársai alkalmaztak. Egy megfelelően létrehozott, kísérletileg validált CFD modell is alkalmas lehet azonban keveredési vizsgálatokra. Előnyük a költséghatékonyság, hiszen fizikai eszközök nem szükségesek hozzá. Szerkezeti és működtetési paraméterek hatásának vizsgálatára is alkalmasak lehetnek, például a multijet keverőfejek kialakítását, a befecskendezés optimális pozíciójának meghatározását vagy optimális térfogatáramokat is meghatározhatunk segítségükkel, mint ahogy Torré és munkatársai mutatják be tanulmányukban [83]. T-keverők esetében a Reynolds szám és a keverőgeometria nagy hatással van a keveredésre, amint az Sultan és munkatársai megmutatták [84], és a keveredés hatékonysága meghatározható CFD módszerekkel, mint például egy speciális geometriába illesztett statikus keverőelem esetében, amelyet Zhou és munkatársai mutattak be [85]. A szimulációs vizsgálatok új keverőfej kialakításának tervezésében is hatékony segítség lehetnek, ahogy például Vasilev és Abiev a tanulmányukban bemutatták [86]. A folyamatfejlesztés területén a modellalapú vizsgálatok elterjedtek, így alkalmazásukra a keveredés vizsgálatában is sok példa található. A CFD szimulátorok alkalmazásával a vegyipari reaktorok működését, belső áramlási viszonyait jobban megérthetjük, a kevert zónák és a holtterek meghatározására is alkalmasak, ahogyan Wang és munkatársai munkájában is láthatjuk [87]. A CFD-n alapuló szimulátorok előnyösen alkalmazhatók új konstrukciók tesztelésére azok megépítése nélkül,

viszont ahogy már említettem, a modell validálás a megbízhatóság érdekében minden esetben elengedhetetlen.

Amikor egy berendezés modelljét hidrodinamikai szempontból validáljuk sok esetben egy összetett folyamattal van dolgunk. Több úton is történhet a hidrodinamikai validálás, a leggyakoribb esetben egy jelzőanyag injektálásán, és annak követésén, mérésén alapul. Folyamatos üzemű egységek esetében a tartózkodási idő vizsgálat egy gyakran alkalmazott vizsgálati módszer. Konduktometriával és videofeldolgozáson alapuló koncentrációméréssel is végrehajtható ez a feladat. Átlátszó falú üstreaktorokban általában keveredési idő méréseket alkalmaznak festékanyag injektálásával vagy sav-bázis reakciók alkalmazásával [88]. A keveredési idő – definíció szerint – az az idő, amelyre a rendszernek szüksége van ahhoz, hogy egy előre definiált homogenitás szintet elérjen. A jelzőanyag koncentrációján alapuló homogenitás szint definíciókra láthatunk példákat Gillian és Kirwan cikkében [89], valamint Krupa és munkatársai cikkében [90]. Egy rendszer homogenitását opálosságának mérésével is lehet jellemezni videofelvétel segítségével, ahogyan az Rahimi és Paraveh tanulmányában is látható [91]. A videofeldolgozáson alapuló módszerek nagy előnye a megismételhetőség. A kihívást a képsorozat feldolgozása jelenti, amely után nyomon követhető a homogenitás időbele változása a reaktoron belül. A homogenitás fogalmához legtöbbször egy küszöbértéket rendelnek, amely felett homogénnek tekintjük a rendszert. Leggyakrabban küszöbértékként a 95-99%-os homogenitást alkalmazzák.

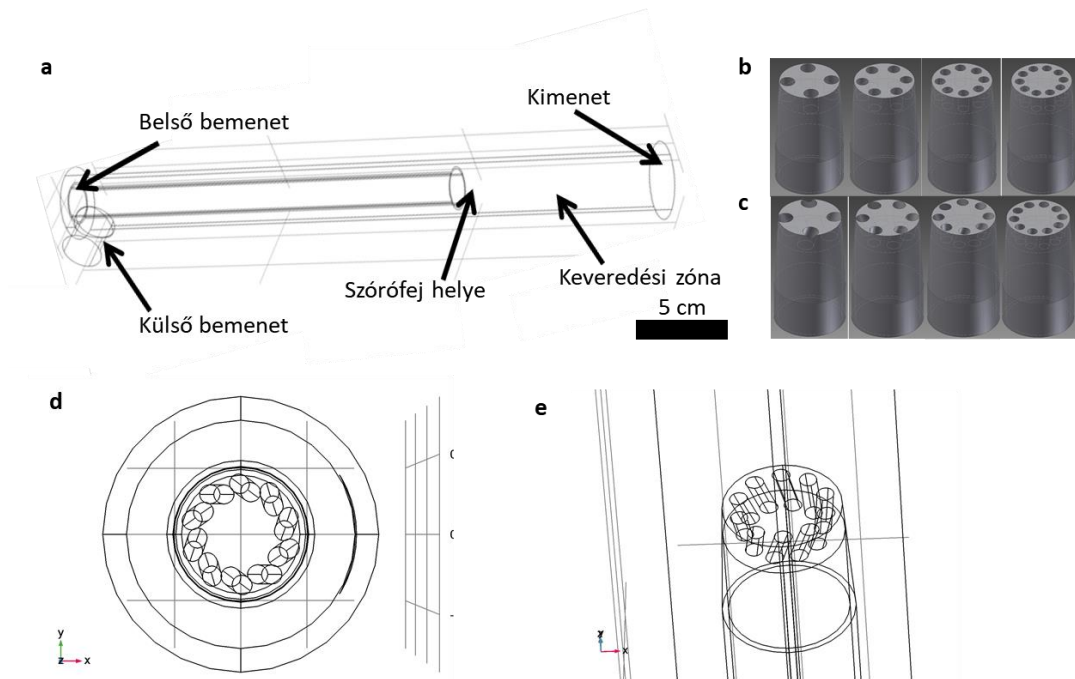
A fentebb említett klasszikus validálási módszerek mellett egy másik lehetőség a CFD modell validálására a szemcsekövetéses vizsgálatok alkalmazása. Szemcsék áramlásba helyezésével a szemcsék útvonala meghatározható például videofelvételen való rögzítésével és képfeldolgozással, ahogyan Egedy és munkatársai mutatták be [92], vagy pozitronemissziós technikával (positron emission particle tracking, PEPT), mint Pasha és munkatársai munkájából látható, amelynek során az egyes radioaktívan megjelölt szemcséket a kisugárzásuk helyének detektálásával nyomon lehet követni [93]. Egyes CFD szoftverekkel szemcsekövetéses szimulációk is végezhetők, amely lehetővé teszi azt is, hogy az eredményeket a mért szemcsetrajektóriákkal validáljuk. A szimulált szemcsék

reprezentálhatnak jelölt fáziselemeket is, megfelelő beállítások mellett. Egy gyakori vizualizálási módja a szemcsetrajektóriáknak a Poincaré metszetek alkalmazása, amely egy keresztmetszeti síkon jelöli az áthaladó szemcsék helyét.

Kutatásomban egy folyamatos üzemű multijet keverő optimális kialakítását határoztam meg a különböző keverőfejekkel nyert kevertségi szint számszerű jellemzése alapján. A cél, hogy jól kevert kimenetet kapjunk két elegyedő folyadékáramból, mivel a reaktortestben lejátszódó gyors reakció minősége nagyban függ a belépő áram kevertségének mértékétől. A kidolgozott CFD modellt jelzőanyag injektálását követő videofelvétel feldolgozásán alapuló tartózkodási idő kísérletekkel validáltam. A szemcsékövetéses szimulációból nyert Poincaré metszet szolgált a kidolgozott számítási módszer alapjául különböző szórófejek keveredési teljesítményének meghatározásához. Keverőfejek kialakításának optimalizálásával, a furatok számának vizsgálatával foglalkoztak Huang és munkatársai egy ásványolaj-ipari alkalmazás példáján keresztül [94]. Patkar és Patwardhan a szórófej furatainak dőlésszögének hatását vizsgálták gáz-gáz keverők esetében [95]. Az általam végzett vizsgálatokban azonban a furatok számának és dőlésszögének hatását is vizsgáltam. A lefedettség, ahogy a későbbiekben látni fogjuk, egy fontos kevertségi mutató, amelyet a kilépő felület Poincaré metszetén elhelyezkedő szemcsék pozíciójából számíthatunk, és akkor a legjobb, ha ezek a pozíciók a felületen egyenletesen oszlanak el, „lefedik” a síkot. A keverés hatékonyságát két különválasztható cél, a lefedettség és a lokális kevertség együttes figyelembevételével határoztam meg. A lokálisan jó kevertség a Poincaré metszeten úgy figyelhető meg, hogy a metszet egyes lokális pontjainak környezetében a metszeten áthaladó összekeverendő komponensek pontjai közel egyenlő számban jelennek meg. Az optimális keverőfej-kialakítás kiválasztása azon alapult, hogy mely esetben nyerhető a legmagasabb kevertségi fok ezen együttes célok figyelembevételével. Az eredmény jelenleg elsősorban az esettanulmányban vizsgált eszköz tervezéséhez nyújt támpontot, azonban a kifejlesztett módszer más hasonló rendszerek keveredési teljesítményének jellemzésére is alkalmazható.

Modell-leírás és módszertan

A cső a csőben elrendezésű multijet keverő modelljét COMSOL Multiphysics-ben készítettem el. A készülék szerkezeti rajzát és a kísérleti eszközök esetében is alkalmazott nyolcféle szórófejet a 4.11. ábra mutatja.



4.11. ábra. a) A modellezett berendezés szerkezeti rajza, és a mérési kísérletekben is alkalmazott b) egyenes és c) döntött furatú szórófejek modellje. A tízfuratos, 20°-kal döntött eset d) felülnézeti és e) oldalnézeti rajza.

A szórófejek formatervezésénél a megmunkálás egyszerűségére is tekintettel voltunk. A szórófejek 4, 6, 8 vagy 10 furattal vannak ellátva, a furatok egyenesek (4.11.b ábra) vagy érintőirányban, a tengelyiránnyal merőlegesen 20°-kal döntöttek (4.11.c ábra). A furatok összesített keresztmetszeti felülete $47,8 \text{ mm}^2$ minden szórófej esetében. A következőkben a szórófejekre úgy fogok hivatkozni, hogy „furatszám_dőlésszög”, tehát például a négyfuratos, egyenes furatú szórófejet a 4_0-s esetnek nevezem.

A bemeneti peremeken $0,0983 \text{ m/s}$ sebességet definiáltam, ez megfelel a kísérletben alkalmazott 90 l/h-s térfogatáramnak. A falak mentén nem-csúszó peremfeltételt, a kimeneti peremen konstans 1 atm nyomást definiáltam. A teljes geometriában konstans 20 °C hőmérsékletű víz van jelen. A folytonossági

egyenlettel és a háromdimenziós, k - ε turbulenciamodell is tartalmazó áramlási modellel (4.7-4.12. egyenletek) végzett stacionárius szimuláció eredményét használtam fel a sebességi mező meghatározására, és további, dinamikus szimulációk végzésére.

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.7)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + (\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] + \mathbf{F} \quad (4.8)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (4.9)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + c_{e1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - c_{e2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4.10)$$

$$\mu_T = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.11)$$

$$P_k = \mu_T [\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] \quad (4.12)$$

ahol μ a közeg dinamikai viszkozitása (20 °C-os víz, 10^{-3} Pa·s), a turbulencia modellparaméterek c_{e1} 1,44, c_{e2} 1,92, c_μ 0,09, σ_k 1, σ_ε 1,3. A turbulencia mozgási (kinetikus) energiája (k) $0,005 \text{ m}^2/\text{s}^2$ és a disszipációs ráta (ε) $0,005 \text{ m}^2/\text{s}^3$.

A turbulenciamodell használatát mind a nyolc szórófej esetében 2000 feletti Reynolds szám indokolta.

A szórófejek keverési teljesítményének értékeléséhez a stacionárius sebességmező felhasználásával dinamikus szemcsekövetéses szimulációkat futtattam, amelyhez a COMSOL Multiphysics Particle Tracing modulját használtam. A szemcsék tulajdonságainak meghatározásakor figyelembe vettem a turbulens áramlás és a fluktuáló sebességmező okozta diszperziót, ezért a discrete random walk diszperziós modellt is alkalmaztam [96]. Ez a sztochasztikus modell diszkrét szakaszonként konstans időbeli függvényekkel határozza meg a fluktuáló sebességkomponenseket, amelyek random értéke az örvények karakterisztikus életideje alatt konstans marad. A két (belső és külső) bemeneten egyenletesen elosztott 5000-5000 szemcsét definiáltam, amelyek pozícióját a szimuláció alatt követtem. A szemcsék nagy száma biztosítja a folyadékáramlás realisztikus

vizualizációját. A szemcsék mozgása az előre kiszámított stacionárius sebességmezőn alapszik, és a kimeneti peremen a freeze (odafagyasztó) peremfeltételnek köszönhetően a pozíciójuk rögzítve marad. Az időfüggő szimulációkat mind a nyolc szórófej alkalmazása esetén 30 s-ig futtattam, amely kellő időt biztosított ahhoz, hogy az összes szemcse beérkezzen a kimeneti peremre.

A részecskekövetéses szimulációk futtatása során bizonyos időintervallumokban a szemcsék pozícióját a program automatikusan mentette. A keveredés hatékonyságának számításához ezeket a rögzített pozícióadatokat használtam, az adatfeldolgozást MATLAB környezetben végeztem. A kezdeti állapot jól definiált szemcsepozíciói lehetőséget adtak arra, hogy a szemcséket megjelöljem az eredetük (külső vagy belső bemenet) alapján. Ez a jelölés változatlanul a szemcsékhez rendelve marad a szimuláció teljes ideje alatt. A megjelenítéshez piros színt használtam azokra a szemcsékre, amelyek a belső bemenetről indultak, és a 0 azonosítót rendeltem hozzájuk. A külső bemenetről származó szemcséket fekete pontokként jelenítettem meg, és 1-es azonosítót rendeltem hozzájuk. A különféle szórófejek keverési teljesítményének jellemzésére a kimeneti síkon generált Poincaré metszeteket vettem alapul. A szimulációs adatok kiértékeléséhez a Poincaré metszetek teljes területét kis négyzetekre osztottam fel, a tanulmányban 276 darab mintavételezési mezőre. Ennél finomabb felosztás nem biztosította volna a kiértékeléshez szükséges elegendő számú szemcsét egy adott mintavételezési mezőn belül, ennél durvább felosztás pedig nem adott volna kellő információt a térbeli eloszlásról. A jelen tanulmányban ismertetendő kevertségi mérték meghatározásához először a mintavételezési mezők szintjén értelmezett lefedettséget definiálom a 4.13. egyenletnek megfelelően.

$$C = \begin{cases} 0, & \text{ha a mintavételezési mezőn nincs szemcse} \\ 1, & \text{ha a mintavételezési mezőn legalább egy szemcse van} \end{cases} \quad (4.13)$$

Bevezetem a $p=(x_p, y_p)$ jelölést a szemcsék kétdimenziós descartes-i koordinátáinak jelölésére, és az $s=(x_s, y_s)$ jelölést a mintavételezési mezők középponti koordinátáinak jelölésére. A mintavételezési mezők számát N -nel

jelölöm. A lokális (mintavételezési mezőnkénti) lefedettségtől függően a lokális kevertséget minden i mező esetében a 4.14. egyenletnek megfelelően számítottam.

$$M_i = \begin{cases} 0 & \text{ha } C_i = 0 \\ \sum_{j=1}^{j=k_i} w_j I_j / \sum_{j=1}^{j=k_i} w_j, & \text{ha } C_i > 0 \end{cases} \quad (4.14)$$

ahol $i=1, \dots, N$, k_i az i -edik mintavételezési mező területén elhelyezkedő szemcsék darabszáma, I_j a j szemcse identitását (melyik bemenetről érkezett) jelöli. 0, ha a belső bemenetről érkezett, 1, ha a külsőről. A j szemcséhez tartozó w_j súlyt a 4.15. egyenlet alapján számoljuk a szemcse és a referenciapont (i -edik mintavételezési mező középpontja) koordinátái közötti euklideszi távolság (d_j) szerint:

$$w_j = \frac{1}{d_j^2} = \frac{1}{(x_{p,j} - x_{s,i})^2 + (y_{p,j} - y_{s,i})^2} \quad (4.15)$$

Egy adott mintavételezési mezőt akkor tekintünk jól kevertnek, ha a lokális kevertségi mérték 0,2 és 0,8 közé esik. Az ideális, legjobban kevert esetben $M_i=0,5$, amely azt jelenti, hogy a két bemenetről érkező jelölőrészecskék darabszámukat tekintve fele-fele arányban vannak, és eloszlásuk a lokális referenciapont körül egyenletes. A teljes metszeti síkra vonatkoztatott keveredés jellemzésére az alábbiakban négy metrikát vezettem be.

A teljes lefedettség (Coverage) a lefedett mezők száma osztva az összes mező számával a 4.16. egyenlet szerint.

$$Coverage = 100 \frac{\sum_{i=1}^{i=N} C_i}{N} \quad (4.16)$$

Az abszolút kevertséget a jól kevert mezők és az összes mező számának hányadosaként definiáltam (4.17. egyenlet).

$$Mix_{abs} = 100 \frac{|\{M_i, i=1, \dots, N | 0,2 < M_i < 0,8\}|}{N} \quad (4.17)$$

A relatív kevertség a jól kevert mező száma osztva a lefedett mezők számával, formálisan a 4.18. egyenlettel leírva.

$$Mix_{rel} = \begin{cases} 0 & \text{ha } |\{C_i, i = 1, \dots, N | C_i = 1\}| = 0 \\ 100 \frac{|\{M_i, i = 1, \dots, N | 0,2 < M_i < 0,8\}|}{|\{C_i, i = 1, \dots, N | C_i = 1\}|} & \text{ha } |\{C_i, i = 1, \dots, N | C_i = 1\}| > 0 \end{cases} \quad (4.18)$$

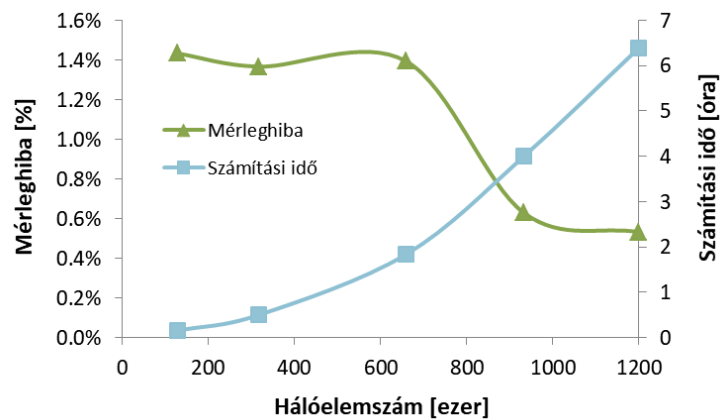
A homogenitás céljának eléréséhez mind a lefedettséget, mind a relatív kevertséget maximalizálni szeretnénk. A negyedik, a teljes metszeti síkot jellemző metrikát a 4.19. egyenlet fejezi ki egy olyan célfüggvény formájában, amely a két célt egyforma súllyal veszi figyelembe.

$$Z = 0,5 \cdot Coverage + 0,5 \cdot Mix_{rel} \quad (4.19)$$

A helyi, mintavételezési mező szintű kevertségi mértékek kiszámítása lehetővé teszi, hogy vizualizáljuk a kevertség eloszlását a kilépő felületen, valamint felhasználásukkal a teljes metszeti síkra vonatkozó metrikákat is meghatározhatunk. A tanulmányban arra voltam kíváncsi, hogy a relatív kevertség és a lefedettség hogyan alakul a szórófej kialakításának (furatszámának és a furatok dőlésszögének) függvényében. A különböző konstrukciók keverési teljesítményének kiértékeléséhez a fent leírt metrikákat alkalmaztam.

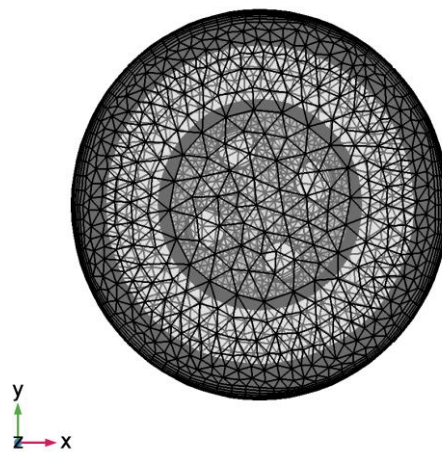
Hálófüggetlenségi vizsgálat

Hálófüggetlenségi vizsgálatot végeztem, hogy a CFD modell megoldásának megbízhatóságáról meggyőződjek. Öt különböző számítási háló használata mellett mérleghibát számítottam, valamint a futáshoz szükséges időt is feljegyeztem. A szimulációk Intel Xeon 2,4 GHz CPU-val és 80 GB RAM-mal rendelkező személyi számítógépen futottak. A 4.12. ábra a 10_20-as konstrukció esetében az impulzusmérlegre lefuttatott hálófüggetlenségi vizsgálat eredményeit mutatja.



4.12. ábra. A hálófüggetlenségi vizsgálat eredménye impulzusmérlegre.

Számításaimhoz a legfinomabb, körülbelül $1,2 \cdot 10^6$ elemszámú számítási hálót alkalmaztam, mert azzal kellően alacsony a hibaérték, a számítási időt tekintve még éppen elfogadható, és a tendencia alapján további finomítástól feltehetően nem várhatunk jelentős javulást a mérleghibát illetően. A számítási háló alapvetően tetraédres elemekből áll. A határfelületeken és a sarkokban kisebbek a hálóelemek ahogy az a berendezés felülnézeti ábráján is látszik (4.13. ábra)



4.13. ábra. A számításokhoz alkalmazott háló a 4_0-s konstrukció esetében.

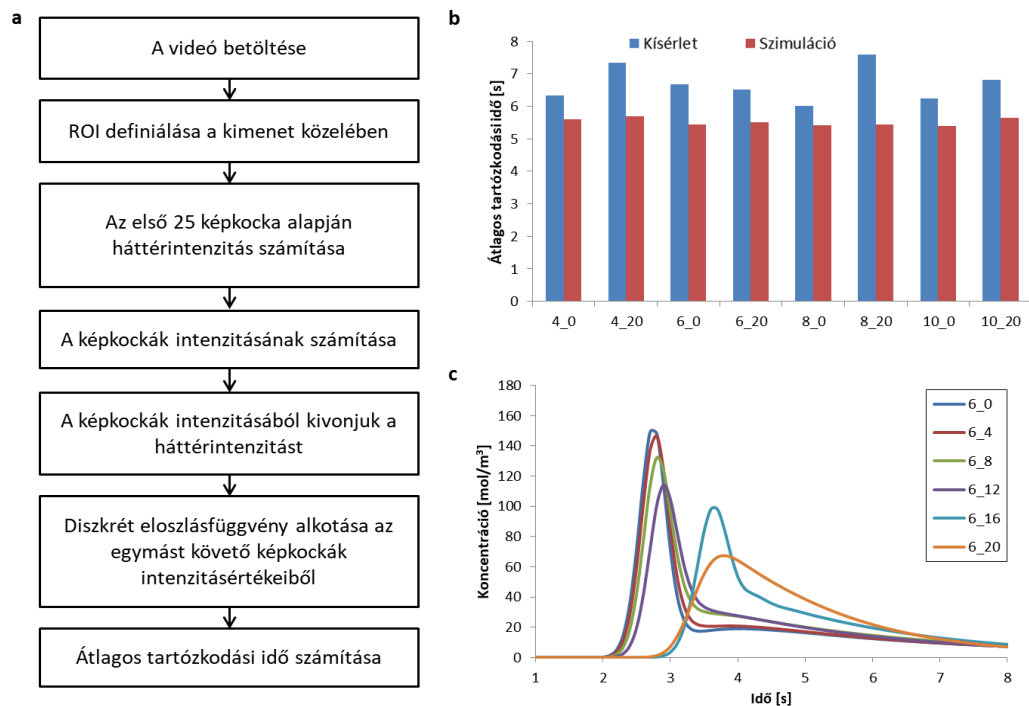
Kísérleti berendezés és tartózkodási idő analízis

A modell kísérleti validálásához létrehoztuk a multijet keverő fizikai modelljét, amely a CFD modellel azonos geometriai paraméterekkel rendelkezik. A cső a csőben elrendezésű eszközhöz tartozó szórófejek Mendelmax 2.0 3D nyomtatóval lettek elkészítve CAD rajzok alapján. A szórófejek a belső cső

végéhez lettek illesztve. A 4.11. ábrán is bemutatott nyolc alap konstrukció a 4, 6, 8 és 10 furatos kialakítás, mindegyik egyenes furatos és érintőirányban 20°-kal döntött szöges változatban.

A fizikai kísérlet során mértük a tartózkodási idő eloszlást piros indikátor használatával. A belső és a külső bemeneten is víz áramot vezettünk be 90 l/h térfogatárammal. A 4 g/l piros színű indikátort Dirac delta függvényhez közelítően, impulzusszerűen juttattuk a rendszerbe. Minden konstrukcióval három mérést végeztünk el, ezek értékeit átlagoltuk. A tartózkodási idő eloszlás meghatározásának első lépésében az indikátor koncentrációval arányos színintenzitás időbeli változását rögzítettük a keverési zónában egy Sony CX115E HD kamerával. A kiemelt képtartomány (Region of Interest, ROI) a közvetlenül a kimenet előtti térrész volt. A 4.13.a ábra a videofelvételek feldolgozásának folyamatát ismerteti. A rögzített képkockák piros, zöld és kék (R, G, B) színtelepekkel álló pixelekből tevődnek össze. A rögzített képkockák színintenzitása arányos az indikátoranyag koncentrációjával. A képkockák színintenzitásának számításához a pixeleinek átlagolt színtelepek értékeit használtuk $((R+G+B)/3)$. A háttérintenzitást ugyanígy számítottuk azokból a képkockákból, amelyekben még nem tűnik fel az indikátor (minden felvétel első 25 képkockája). Az így kapott háttérintenzitás értéket kivontuk az összes képkocka intenzitásértékéből, hogy a jelzőanyagot nem tartalmazó képkockák intenzitása 0 legyen. A tartózkodási idő eloszlásfüggvény az egymást követő pillanatok rögzített képeinek színintenzitás-értékeiből áll össze. Utolsó lépésként kiszámítottuk az átlagos tartózkodási időt. A kísérletekből adódó átlagos tartózkodási időket az egyes szórófej-konstrukciók esetében a 4.14.b ábrán lévő kék oszlopok mutatják.

A fent részletezett módon végzett kísérletek eredményeihez hasonlítottuk a CFD modell eredményeit. A CFD modell alkalmazásával úgy nyertünk RTD görbét, hogy a jelzőanyagot impulzusszerűen (0,2 s-on keresztül) vezettük be a belső bemeneten keresztül, és ezt követően időpillanatonként rögzítettük a kimeneti peremen jelentkező jelzőanyag koncentrációt. A görbék alapján átlagos tartózkodási időt számítottam minden esetre a 3.8. egyenlet szerint. Ezek értékét a 4.14.b ábrán lévő piros oszlopok jelölik.



4.14. ábra. a) A videofeldolgozás folyamatábrája. b) Modell validáció a kísérleti és szimulációs átlagos tartózkodási idők összehasonlításával. c) Koncentrációgörbék hatfuratos, különböző dőlésszögű szórófejet alkalmazó szimulációk esetében.

A 4.14. ábra b) részében oszlopgrafikonon ábrázoltam a méréssel és a szimulációval nyert átlagos tartózkodási időket. Habár a tökéletesen kevert egységek átlagos tartózkodási időinek azonos térfogatáramok és térfogatok mellett azonosnak kell lenni a 4.20. egyenlet alapján, a mi esetünkben nem beszélhetünk tökéletes kevertiségről, és a holtterek kialakulása miatt a valódi térfogat a geometriai térfogatnál kisebb.

$$\frac{V}{Q} = \frac{1.4 \cdot 10^{-4} m^3}{90 \frac{l}{h}} = 0.0015 h = 5.6 s \quad (4.20)$$

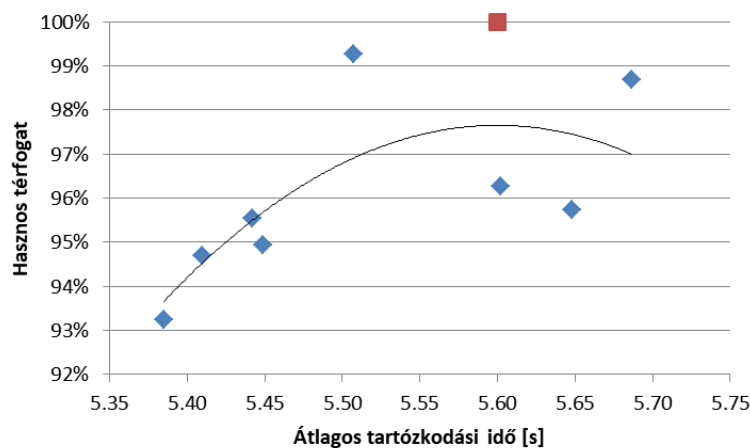
ahol V a térfogat és Q a térfogatáram.

A valódi, hasznos térfogatot úgy számítottam, hogy csak azoknak a hálóelemeknek a térfogatát adtam hozzá a teljes bejárt térfogathoz, amelyben a sebesség nagyobb volt, mint 0,01 m/s. Ezt elosztva a geometriai térfogattal, a 4.5. táblázat értékeit kaptam az egyes szórófej-alapesetekre.

4.5. táblázat. Az alapesetek szimulációból számított átlagos tartózkodási idők és a holtterek leszámításából adódó hasznos térfogatok.

Eset	Átlagos tartózkodási idő [s]	Hasznos térfogat
4_0	5,60	96,26%
4_20	5,69	98,67%
6_0	5,44	95,53%
6_20	5,51	99,92%
8_0	5,41	94,69%
8_20	5,45	94,93%
10_0	5,38	93,24%
10_20	5,65	95,73%

A táblázat adatait pontdiagramon megjelenítve a 4.15. ábrát kapjuk. Ezen piros négyzettel jelöltem az ideális, tökéletesen kevert esetet.



4.15. ábra. A nyolc alapesetre számított hasznos térfogatok és az átlagos tartózkodási idők alakulása (kék rombusz) és a tökéletesen kever egységtől várt eredmény (piros négyzet).

A holtterek jelenléte csak csökkentené az átlagos tartózkodási időket, de a vizsgált esetekben visszakeveredés is történhetett (ahogy majd a 4.16. ábrán az áramvonalakból látszik is), amelynek a hatása viszont megnöveli a tartózkodási időt.

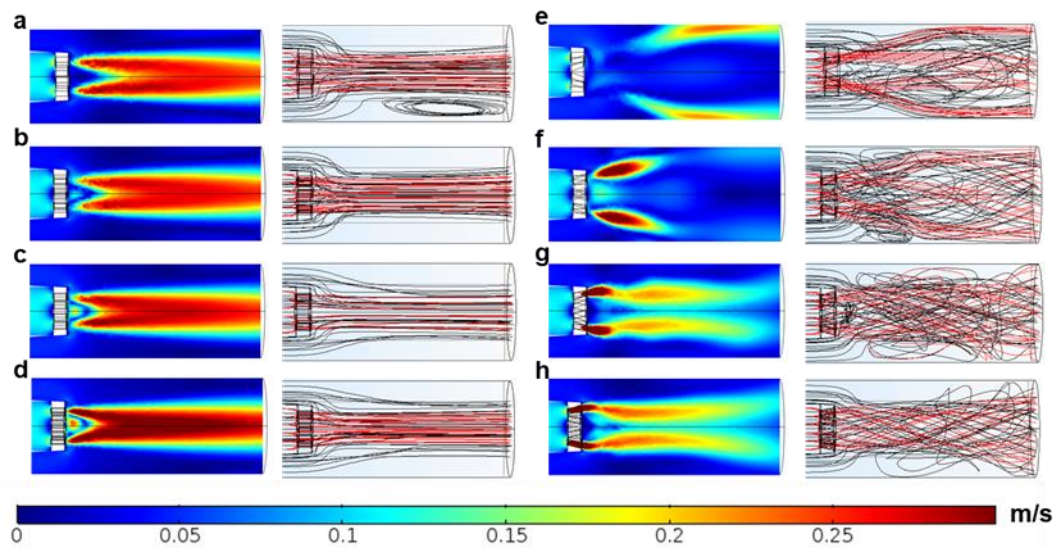
A mért és a szimulációból számított átlagos tartózkodási idő értékek között az egyezést a legtöbb esetben elfogadhatónak találtuk, ezen eredmények alapján

validáltnak tekintjük a CFD modellt. Jól látszik a dőlésszög hatása a tartózkodási időre. Minden típusnál igaz, hogy a döntött furatos konstrukciók esetében nagyobb az átlagos tartózkodási idő. Ez a tény a keveredésre jó hatással lehet, ahogy azt majd később látni fogjuk. A jelenséget vizsgálva a 6 furatos kialakítással több szimulációt is futtatunk, melyekben a furatok dőlésszögét változtattuk. A dőlésszög növekedésével jobbra tolódó koncentrációgörbét mutatja a 4.14.c ábra.

Eredmények és értékelésük

A jelen esettanulmány célja, hogy a korábban bemutatott multijet keverő készülék számára a legmegfelelőbb szórófejet kiválasszuk. A kiválasztás legfőbb szempontja, hogy a lehető leghatékonyabb keveredést biztosítsa és ezzel a keverő követő reaktorban a gyors reakciók során a mellékreakciók esélyét csökkentsük.

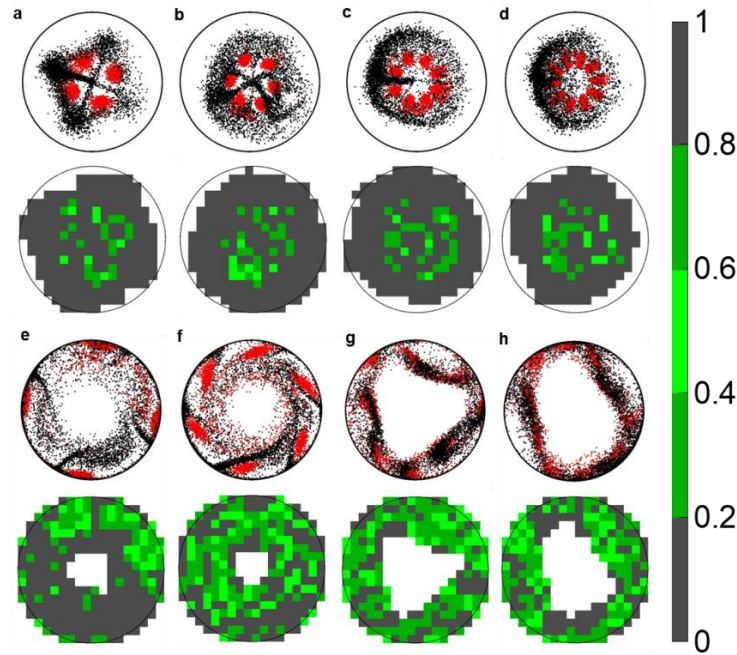
A vizsgálat első lépéseként a validált CFD modellel szimuláltam a jetkeverő működését. A 4.16. ábra a nyolc alapesetből nyert sebességmező hossz menti keresztmetszetét mutatja a keverési zóna helyén. A sebesség magnitúdója helyileg megnövekszik a szűk keresztmetszetű furatokban. Mivel a furatok összkétszámterülete megegyezik, ezért minél több furat van, annál szűkebbek az egyes furatok, ezáltal a jet hatás is fokozottan érvényesül. A sebességprofilok mellett az áramlási kép szemléletesebb megjelenítése érdekében áramvonalakat is ábrázoltam a belső és a külső bemenetről indítva 25-25-öt. Piros vonalak jelzik a belső bemenetről induló áramvonalakat, fekete vonalak a külsőről indulókat. Az egyenes furatos szórófejek esetében a fáziselemek a cső közepe felé terelődnek (4.16. ábra a-d), míg a döntött furatosok esetében az áramvonalak a cső fala felé helyezkednek el (4.16. ábra e-h), feltehetően holt teret alakítva ki a belső térrészekben. Az áramvonalak alapján azt is megfigyelhetjük, hogy a döntött furatos szórófejek esetében hatásosabb a keveredés.



4.16. ábra. Hosszmenti sebességprofilok és áramvonalak a keveredési zónában a nyolc szórófej-konstrukció esetében. a-d) rendre 4_0, 6_0, 8_0, 10_0, és e-h) 4_20, 6_20, 8_20, 10_20 esetek.

A 4.16. ábrán a sebességi mezők és az áramvonalak a különböző szórófejek keverőteltjesítményének csak vizuális kiértékelését teszik lehetővé. A keverési hatékonyság számszerű jellemzéséhez kidolgoztam egy szemcsékövetéses szimuláción alapuló kiértékelési módszert. A módszer bemutatásához a validált CFD modellt és az előzőekben ismertetett keverési mértékeket használok fel.

A CFD modell által számított stacionárius áramlási mező felhasználásával időfüggő szemcsékövetési szimulációkat futtattam, melyek során a fáziselemt jelölő, belső és külső bemenetről egyforma darabszámú, a bemeneti felületen egyenletes kezdeti eloszlású szemcsék pozícióadatait rögzítettem további feldolgozás céljából. A kimeneti síkon áthaladó szemcsék identitása és felületi pozíciója szolgáltatja az alapot a konstrukciók keverési teljesítményének értékeléséhez, ezeket Poincaré metszetek formájában a 4.17. ábrán mutatom be. A jól kevert rendszerek esetében a piros és fekete pontok egyenletes eloszlással helyezkednek el a sík teljes területén. A hossz menti áramvonalas ábrák alapján sejtett jelenséget a Poincaré metszetek is megerősítik: az egyenes furatos szórófejek a cső középső régiójában tartják a követett szemcséket, míg a döntött furatos konstrukciók a cső fala felé terelik.



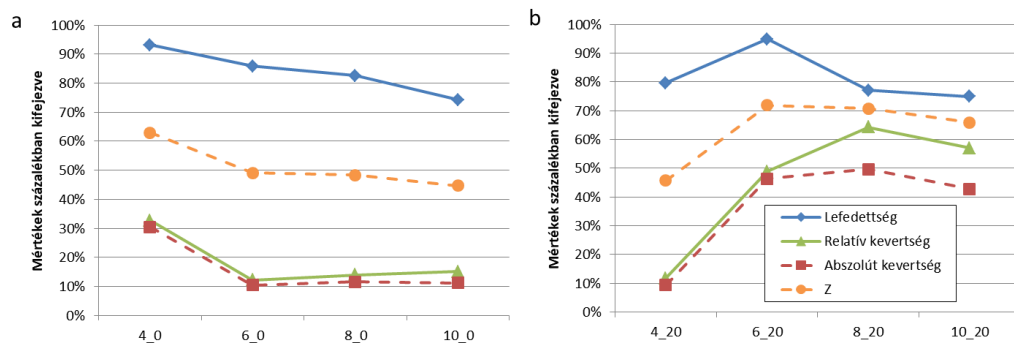
4.17. ábra. Poincaré metszetek és kevertségi térképek a kimeneti síkon a nyolc szórófej-konstrukció esetében. a-d) rendre 4_0, 6_0, 8_0, 10_0, és e-h) 4_20, 6_20, 8_20, 10_20 esetek.

Ahhoz hogy jól kevert rendszerünk legyen, két célt kell egyszerre elérni. Először is a pontoknak a Poincaré metszeten minél egyenletesebben kellene elhelyezkedniük, tehát a holttereket minimalizálni kell. Másodsor a piros és fekete jelölők száma lokálisan a mintavételezési mezőkben közel egyenlőknek kellene lenniük. A Poincaré metszetek adatai, a részecskék pozíciója és identitása (piros vagy fekete) jól használhatóak a lokális és a teljes kilépő felületre vonatkozó kevertségi mértékek meghatározásához, így számszerűen, kvantitatíve kifejezhetjük a keverési hatékonyságot.

A Poincaré metszet adatait felhasználva kevertségi térképeket hoztam létre mind a nyolc szórófej használata esetén, melyek egy első benyomást adnak a rendszer kevertségi állapotáról (4.17. ábra). Minden egyes mintavételezési mezőben lokális kevertségi mértéket számítottunk a 4.14. egyenlet alapján, és a kapott számértéknek megfelelően a mezőhöz egy színt rendeltünk. Fehér maradt a mező, ha a Poincaré metszet alapján egyetlen szemcse sem érkezett az adott mintavételezési területre. Ezek a fehér területek a holttereket jelölik, ahol az áramlás sebessége alacsony. A mintavételezési mezőt szürkére színeztem, ha a lokális kevertség 0,2 alá vagy 0,8 fölé esett. Ez azt jelenti, hogy vagy a piros

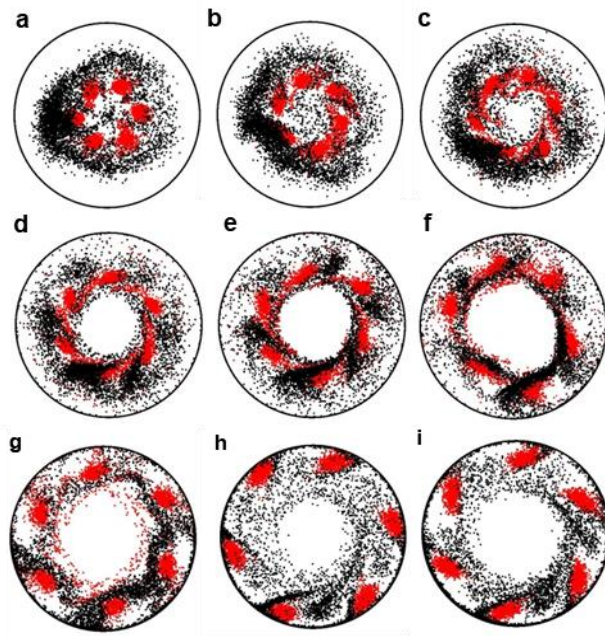
szemcsék vagy a feketék voltak túlsúlyban. A kevertség szempontjából az identitás mindegy, ezeket a területeket gyengén kevert régióknak tekinthetjük. A legjobban kevert mezőket világoszölddel jelöltem, ezek azok a mezők, ahol az M_i értéke 0,4 és 0,6 közöttinek adódott. Sötétzölddel a közepesen jól kevert mezőket jelöltem. Ahogy a 4.17. ábrán is látszik, azok a szórófejek, amelyek több furattal rendelkeznek, jobb keverési teljesítményt nyújtanak, különösen is a döntött furatosak, igaz esetükben a jól kevert régiók az eszköz fala körül alakulnak ki.

A szórófejek keverési teljesítményét a korábban bevezetett metrikák számításával is értékeltem. A teljes kilépő felületre négy metrikát definiáltam: a lefedettséget, a relatív kevertséget, az abszolút kevertséget és a Z célfüggvényt. Ezek mindegyikét a nyolc esetre kiszámítottam, és a kapott értékeket grafikonon a 4.18. ábrán ábrázoltam. Az egyenes furatú szórófejek esetében mind a négy metrika vagy stagnált, vagy csökkent, a relatív és abszolút kevertség esetében minimálisan növekedett 6-tól 10 furatig. A döntött furatú szórófejek ígéretesebbnek mutatkoztak, a 6_20-as konstrukció érte el a maximumot a lefedettség és a Z függvény érték esetében, a 8_20-as konstrukció pedig az abszolút és relatív kevertség esetében (4.18. ábra). A mindkét (lefedettség és kevertség) célt egyforma súllyal figyelembe vevő Z célfüggvény értékének maximumát vettem mérvadónak, ezzel a nyolc vizsgált szórófej közül a 6_20-as konstrukciót találtam a leghatékonyabb keverést biztosító kialakításnak, amelyet egyébként a 4.17. ábra vizuális keveredési térképe is megerősít. A pontdiagramon az összekötő egyenesek csak a szem vezetését segítik, értékek csak a pontok helyén vannak.



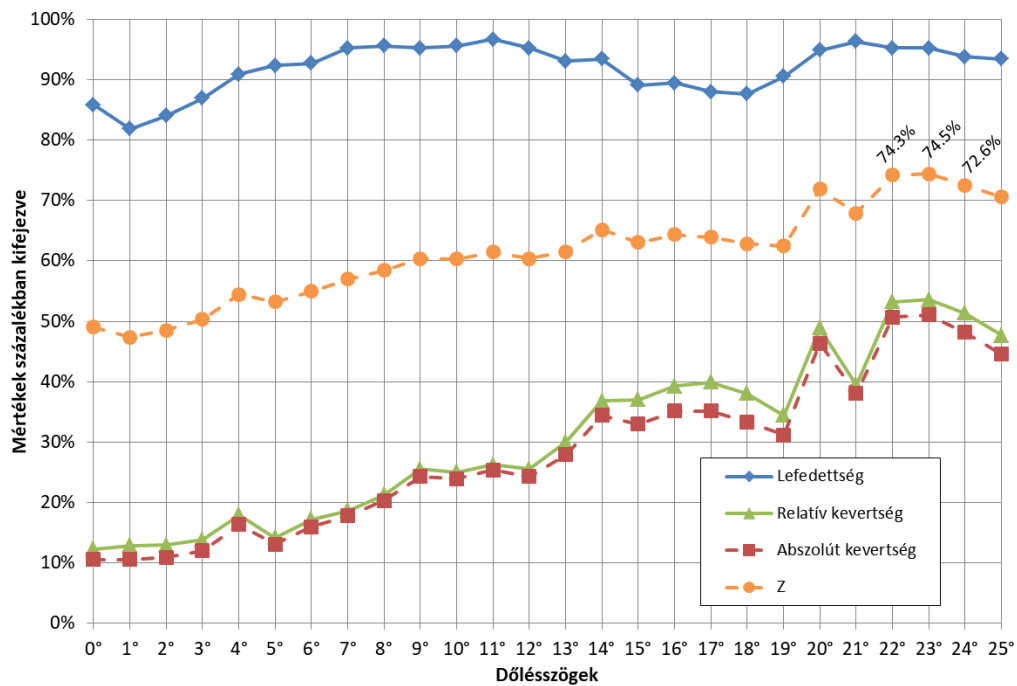
4.18. ábra. A teljes kilépő felületre számított keveredési metrikák a) az egyenes furatú szórófejek, és b) a döntött furatú szórófejek esetében.

A következőkben azt vizsgáltam, hogy a hatékonyság növelhető-e a dőlésszög változtatásával, ezért a legeredményesebbnek adódott hatfuratos esetre dőlésszög vizsgálatot végeztem 0° -tól 25° -ig 1° -os lépésközzel. A lefedettség vizuális értékelésére alkalmas Poincaré metszeteket néhány dőlésszög esetében a 4.19. ábra mutatja. Jól megfigyelhető rajtuk, hogy a dőlésszög növelésével hogyan alakul ki a cső közepén egyre jobban a holtter, ahogy a fáziselemek a cső fala felé terelődnek. Megfigyelhető azonban az a jelenség is, hogy meredek dőlésszög esetén habár a falhoz terelődnek a jelölőszemcsék, onnan vissza is verődnek, ezzel viszont csökkentik a cső közepén kialakuló holtteret.



4.19. ábra. Poincaré metszetek a hatfuratú, különböző dőlésszögű szórófejek esetében. A dőlésszög az a)-i) ábrákon rendre 1° , 4° , 7° , 10° , 13° , 16° , 19° , 22° , 25° .

Az összes vizsgált eset metrikáinak értéke a 4.20. ábrán látható. Ahogy a görbékől látszik, a lefedettség a 11° -os dőlésszögű furatnál éri el maximumát, az erősebben döntött furatok fal felé terelő hatása már hátráltatja a holtterek csökkentését. A dőlésszög további növelése 18° fölött azonban a visszaverődő falhatás miatt újból növeli a lefedettséget. Mind az abszolút kevertség, mind a Z célfüggvény értéke a 23° -os dőlésszögnél éri el maximumát.



4.20. ábra. A teljes síkra számított metrikák alakulása a 6 furatos konstrukcióban különböző (0-25°) dőlésszögek esetében.

A számszerű eredmények alapján az esettanulmányban vizsgált cső a csőben elrendezésű többfuratos jetkeverő számára a 6_23-as szórófej-konstrukciót javasoltuk. Ez 95,3%-os lefedettséget, 51,1%-os abszolút kevertséget és 74,5%-os kombinált kevertségi értéket eredményez a Z célfüggvény szerint.

Összefoglalás

Az esettanulmányban létrehoztam egy cső a csőben elrendezésű többfuratos jetkeverő CFD modelljét. A modellt fizikai rendszeren végzett mérésekkel validáltuk a tartózkodási idő analízis módszerével. A kísérletben videokamerával rögzítettük a befecskendezett festékanyag kimosódását, és ebből meghatároztuk a jellemző tartózkodási idő eloszlás függvényét, majd kiszámítottuk az átlagos tartózkodási időt. A szimulációban komponensmérleg alkalmazásával az impulzusjelre adott válaszfüggvény alapján számítottam az átlagos tartózkodási időt. A különböző szórófejek keverési teljesítményének számszerű értékeléséhez szemcsekövetési szimulációkat futtattam. A homogenitás magas fokának elérése a keverőegységet követő reaktor megfelelő működéséhez elengedhetetlen. Poincaré metszetek formájában rögzítettem a jelölőszemcsék pozícióját abban a

pillanatban, amikor a berendezést elhagyják. A pozíció és az identitásadatok felhasználásával keveredési metrikákat definiáltam és számítottam. A módszer legnagyobb előnye a hagyományos, komponensmérleg számításán alapuló szimulációs vizsgálatokkal szemben, hogy az itt bemutatott számításokhoz csak a stacionárius sebességmezőt használjuk fel, emiatt számíthatékonyabb. A teljes kilépő felületre definiált kevertiségi metrikák lehetővé teszik a különböző szórófej-konstrukciók keverőteljesítményének számszerű összehasonlítását. A nyolc alap kialakításból a 6 furatos, 20°-kal döntött furatú szórófej nyújtotta a legjobb keveredési eredményt a lefedettséget és kevertiséget egyformán figyelembevevő Z célfüggvény alapján. További vizsgálatokat végeztem a dőlésszögekkel, amelyekből a 6_23-as konstrukció adódott legjobbnak. Fontos megjegyezni, hogy a szórófejek kialakításánál figyelemmel voltunk az egyszerű fizikai megvalósíthatóságára is.

További tervek közt szerepel a keverőfej konstrukció még jobb eredményt nyújtó fejlesztése, és a működtetési paraméterek beállítása a multijet keverő lehető leghatékonyabb működése érdekében. A szemcsekövetési kísérleteket ki lehetne egészíteni háromdimenziósra, mely során a teljes keverési zónában található pozícióadatok felhasználásával a tanulmányban ismertetett módon számítanánk a keveredés mértékét egy adott időpillanatban. Érdekes lehetne még az is, hogy a kilépő peremre érkező jelölőszemcsék időbeliségét figyelembe vesszük, vagy mondjuk szomszédos jelölőszemcsék esetén a trajektória szétválásokat vagy megmaradásokat figyeljük. A tanulmányban bemutatott módszer a keverési teljesítmény értékeléséhez alkalmas lehet hasonló rendszerek vizsgálatához is, ennek további példákon való bemutatása is lehet egy jövőbeli feladat.

4.3. Laboratóriumi méretű fluidizációs berendezés CFD modellezése direkt numerikus módszerrel

A fluidizáció művelete olyan vegyipari folyamatokban fordul elő, amelyekben szilárd szemcsetömeget szeretnénk érintkeztetni gázzal. A fluidizáció lényege, hogy a kezdetben nyugvó fluidágy gázzal történő befűvás hatására a szemcsetömegnek bizonyos szempontból folyadékokra jellemző tulajdonságai lesznek. A cél lehet kémiai folyamatok intenzifikálása (például katalizátorszemcsék esetében) vagy fizikai művelet, például szárítás, keverés hatékonyabbá tétele. A szilárd szemcsékből álló töltet fluidizált állapotában intenzívebben megy végre komponens- vagy hőátadás, ezért a vegyiparban a fluidizációs műveletek kutatása érdekes és fontos területet jelent. Fluidizációt alkalmaznak az ásványolaj-iparban a fluidágyas katalitikus krakkolás (fluid catalytic cracking, FCC) során, amelynek modellezésével és szimulációjával foglalkoznak John és munkatársai [98], statisztikai elemzésükkel és optimalizációval pedig Ebrahimi és Ghazvini [99]. Forgóágyas fluidizációs berendezéssel a szemcsék válogatását lehet elvégezni [100]. Idakiev és munkatársai a fluidágyak induktív fűtésének vizsgálatával foglalkoztak, azon belül is azzal, hogy a hőátadás hogyan hat a magára a fluidizációra [101], a szilárd szemcsék szárítására [102], és bevonásukra [103]. A legtöbb kísérleti fluidizációs berendezés egy hengerből áll, benne a szilárd szemcsés töltettel. Ilyen berendezésekben végezték a méréseket az utóbb felsorolt tanulmányokban is. Gyakori kialakítás az úgynevezett kvázi kétdimenziós kísérleti fluidizációs ágy is. Ez egy olyan háromdimenziós berendezés, amelynek mélység paramétere nem számottevő a szélességhez és magassághoz képest, és tulajdonképpen egy hengeres berendezés keresztmetszetét utánozza. Az ilyen kísérleti berendezések előnye, hogy segítségével láthatóvá válnak a részecskeágy belsejében lezajló fluidizációs folyamatok, a részecskék mozgása, és tanulmányozhatók a különböző fluidizációs sebességek mellett kialakuló szilárd-gáz kétfázisú áramlás.

A fluidizációs folyamatra is igaz az az általános megállapítás, hogy a részletes, szemcseszintű modellek alkalmazásával részletes képet kaphatunk a fluidágyban kialakuló gáz-szilárd kétfázisú áramlásról. Az irodalmi áttekintés fejezetében már ismertettem a leggyakrabban alkalmazott modellezési

módszereket, azok közül esettanulmányomban a direkt numerikus szimuláció módszerét alkalmaztam.

Gáz-szilárd rendszerek esetében a fluid fázis összenyomható, ezért az áramlás dinamikáját leíró parciális differenciálegyenletek hiperbolikus jellegűek lesznek, ennek megfelelően a megoldásukra alkalmazható például a bevezetőben bemutatott MacCormack véges differenciák módszerén alapuló kétlépéses, térben és időben is másodrendű pontosságú algoritmus. Mivel a fluidizációs folyamat során a gáz betáplálás kezdetekor vagy időközben nagy sebességgradiensek alakulhatnak ki a fluidággyban, a megoldómódszer sajátosságából eredő esetleges numerikus oszcillációkat a megoldásban fontos lenne elkerülni TVD-MacCormack módszer alkalmazásával. Erre ebben az esettanulmányban még nem került sor. A modell validálásához a kétdimenziós szimulációs eredményeket össze lehet hasonlítani a kvázi kétdimenziós fluidággyal történő kísérletek nagysebességű kamerával készült videofelvételek képfeldolgozás során nyert részecske pozíció adatokkal.

Modellegyenletek

A fluidizációs folyamat, a gáz-szilárd kétfázisú áramlás modellezésére a diszkrét numerikus szimulációk közé tartozó immersed boundary módszert választottam. A gázfázisra felírt 2D-s momentummérlegben a viszkozitást elhanyagoltam, mert annak hatása nem befolyásolja számottevően az áramlási változók értékét. Az Euler egyenletek megmaradási alakja szolgált alapul a számításaimhoz (4.21-4.24. egyenletek).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial z} = 0 \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m^2}{\rho} + p \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n \cdot m}{\rho} \right)}{\partial z} = f_x \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m \cdot n}{\rho} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n^2}{\rho} + p \right)}{\partial z} = f_z \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m}{\rho} (\rho E + p) \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n}{\rho} (\rho E + p) \right)}{\partial z} = 0 \quad (4.24)$$

ahol ρ az áramló közeg sűrűsége, m és n az x és a z irányú sebesség és a sűrűség szorzata rendre (a momentumok intenzív megfelelői), E a belső és a mozgási energia összege, p a nyomás, t , x és z az idő- és helykoordináták rendre. f_x és f_z a body force tagok, melyek a hely és az idő függvényei.

A fenti egyenletek megoldásához a MacCormack módszert alkalmaztam. A szimulációs vizsgálatokban nem a teljes berendezés és az összes részecske áramlását számítottam, hanem egyetlen részecske mozgását tekintettem a tényleges berendezésnél kisebb számítási tartományon. A kísérleti berendezést és a számított tartomány nagyságát a 4.21. ábra reprezentálja.



4.21. ábra. A kvázi kétdimenziós fluidágy megjelölve a kiemelt, modellezett térrészt és egy, a videofeldolgozás alapján felismert és követett golyót.

A kétdimenziós áramlási modellben a 4.21. ábrán jelölt téglalap alsó éle a bemeneti perem. Itt a beáramló gáz sebességére a 3,33 m/s értéket vettem fel, mivel a perem szélessége a fluidágy teljes szélességének harmada, a bevezető csokon pedig szabályozottan 10 m/s a sebesség. A kimeneti peremen (a téglalap felső éle) konstans, légköri (10^5 Pa) nyomást, az oldalsó falakon pedig nemcsúszó (no-slip) peremfeltételt definiáltam. Kezdeti feltételként a teljes geometrián a momentumokat illetően x és z irányban is $0 \text{ kg/m}^3 \cdot \text{m/s}$ -ot adtam meg, a sűrűséget az egyetemes gáztörvény alapján a megadott kezdeti légköri nyomásból, a levegő átlagos móltömegéből (28,8 g/mol), az egyetemes gázállandóból ($R=8,314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$) és a hőmérsékletből (a szimuláció teljes ideje

alatt konstans 298 K (25 °C)) számítottam. A peremeken és kezdeti feltételként az egész térrészben a belső és mozgási energiát a 4.25. egyenlet alapján számítottam.

$$\rho E = \frac{p}{\gamma-1} + \frac{(m^2+n^2)}{2\rho} \quad (4.25)$$

ahol $\gamma=1,4$ a 20 °C-os levegőnek megfelelően.

Fáziskölcsönhatás

Az immersed boundary módszernek megfelelően a virtuális peremek kialakulása a momentumegyenletek jobb oldalához adott térfogategységre vonatkoztatott fajlagos erőkkel, ún. body force tagok segítségével valósul meg. Ezek értékét a direct forcing módszer szerint számítottam (lásd 2.3.2. alfejezet). A body force tagok alkalmazásának köszönhetően a gázfázis sebessége úgy kerül meghatározásra, hogy a részecske közvetlen környezetében az megegyezik a részecske sebességével. A lagrange-i rácspontok közelében elhelyezkedő euleri pontokat egy távolságalapú feltétel szerint detektáljuk, és a lagrange-i pontoktól való távolságuk szabja meg, hogy milyen mértékben vannak egymásra hatással. A 2.3.2. alfejezetben bemutatott interpolációs függvények közül esettanulmányomban a háromszögfüggvényt alkalmaztam a 4.26. egyenletnek megfelelően.

$$w(d) = \begin{cases} \frac{h - |d|}{h}, & 0 \leq |d| \leq h \\ 0, & h < |d| \end{cases} \quad (4.26)$$

ahol w a súly ($[0,1]$), h az euleri háló rácsszélessége, d az adott euleri és lagrange-i rácspontok közötti euklideszi távolság.

A másik irányban is hat a kölcsönhatás, a szilárd test pozíciójának változása az azt körülölelő gázáram tulajdonságaitól függ. A testre ható erőket lagrange-i pontonként számítjuk a környezetében található euleri pontok súlyozott nyomásértékéből, majd ezek szummájából számítjuk a test középpontjára ható erőt, ennek alapján pedig a pozícióváltozásukat. Az áttekinthetőség érdekében

egyetlen szemcsére ható erő számítási algoritmusát az alábbi felsorolással adom meg.

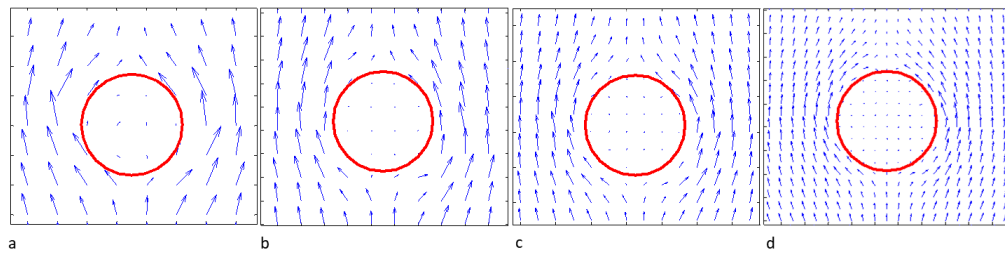
Egyetlen szemcsére ható erő számítási algoritmusa

1. Sorba vesszük az euleri rácspontokat;
2. Minden euleri ponthoz sorba vesszük a szemcse határát reprezentáló lagrange-i rácspontokat, ahol
 - I. kiszámítjuk az i, j euleri rácspont és az adott lagrange-i rácspont (X) euklideszi távolságát,
 - II. a távolságot felhasználva az interpolációs függvény segítségével 0 és 1 közötti súlyt (w) rendelünk az adott euleri-lagrange-i rácspont párhoz,
 - III. dimenzióként kiszámítjuk az adott lagrange-i pontra az adott euleri pontban számított tulajdonságok alapján az erőt:
 - a. $\mathbf{F} = -p \cdot w \cdot ds \cdot \mathbf{n} - \mathbf{G}$
ahol p a nyomás, w a súly, ds a felületelem hossza, $\mathbf{n}$ a normálvektor, $\mathbf{G}$ a gravitációs erővektor;
3. Összegezzük a lokálisan számított erőket;
4. Kiszámítjuk a gyorsulást a részecskére ható erőből ($a=F/m$);
5. Kiszámítjuk a részecske sebességváltozását a gyorsulásból;
6. A sebesség alapján kiszámítjuk az időlépés alatt bekövetkező pozícióváltozást;
7. A szemcse pozícióját frissítjük az előző időlépésbeli pozíciója és a számított elmozdulás alapján.

A fenti lépések az általam alkalmazott módszert mutatják be a szemcsére ható erő kiszámításához.

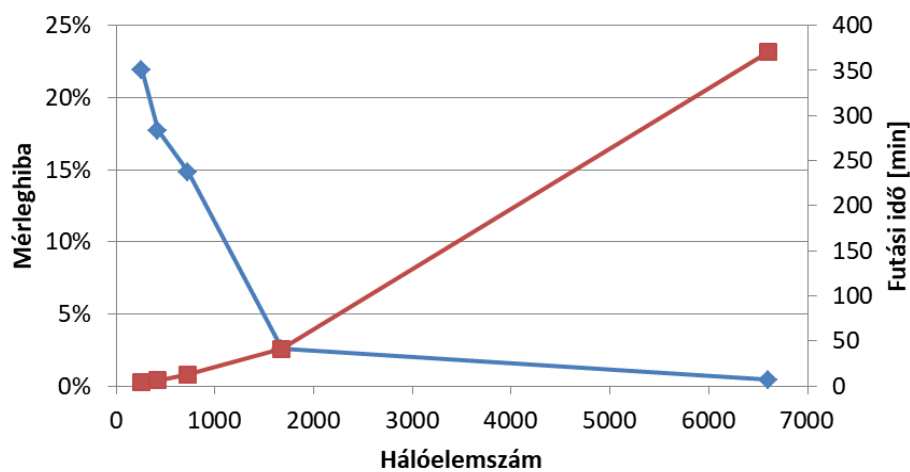
Eredmények

A kísérleti validáláshoz a 3.8. alfejezetben bemutatott eszközöket használtam. A nagysebességű Optronics CL600x2 kamerával készített 500 fps-os nyers videofelvételt MATLAB környezetben dolgoztuk fel. A szimulációt négyféle hálófinomsággal is lefuttattam. A sebességvektorokat kirajzoló ábrán jól látható, hogy az áramlás kikerüli a részecskét a virtuális peremének megfelelően (4.22. ábra).



4.22. ábra. Sebesség-vektormező a különböző finomságú euleri hálók esetén. A rácsszélesség a) 0,001 m, b) 0,0008 m, c) 0,0006 m, d) 0,0004 m volt.

Számításaimat egy 16 GB memóriával rendelkező Dell Optiplex 790 PC-n végeztem. A direkt numerikus szimulációk esetében ajánlott az euleri rácsszélességnek a szemcse méretétől legalább egy nagyságrenddel kisebbnek lenni, ezért egyes vizsgált eseteket eleve kizárhattam volna, de azért azokkal is elvégeztem a hálófüggetlenségi vizsgálatot (4.23 ábra), melynek alapján a 1672 elemszámot eredményező 0,0004 m-es rácsszélességű hálót választottam a további számításaimhoz.

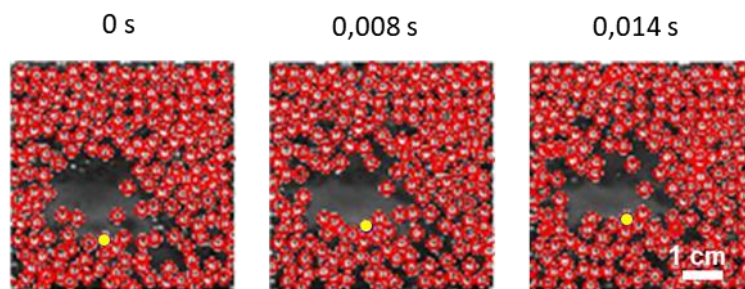


4.23 ábra. Tömegmérlegre számított hálófüggetlenségi vizsgálat eredménye különböző rácsszélességek alkalmazása mellett.

Az időbeli lépésköz (dt) $7 \cdot 10^{-7}$ s körül változik a CFL stabilitási kritériumnak megfelelően, emiatt nagyszámú időlépés szükséges ahhoz, hogy a szimulációs (valós) időben néhány század másodpercig is eljussunk.

A videofeldolgozás során a nagysebességű kamera által rögzített képsorból kiválasztottunk egy olyan szemcsét, amely éppen fölfelé mozgott (a fluidágyban

képződő gázbuborékokban a gázáram felhajtó hatása és a gravitáció hatása egyaránt érvényesül). A kiválasztott szemcse trajektóriáját a képkockákon keresztül követtük. Minden 0,002. másodpercben rögzített a kamera egy képkockát. Kiválasztottam a 0 s, a 0,008 s és a 0,014 s-ban rögzített képkockákat (4.24. ábra), és a kiválasztott szemcsét megjelölve pozícióváltozásból sebességet számoltam, ezt tekintettem mérési értéknek (4.6. táblázat).



4.24. ábra. A kísérlet képfelvételei nyomán követett szemcsemozgás három kiemelt időpillanatban.

4.6. táblázat. A mérésből nyert pozícióváltozások és az ebből számított sebességértékek.

Időintervallum	Pozícióváltozás	Számított sebesség
0-0,008 s	0,0039 m	0,49 m/s
0,008-0,014 s	0,0029 m	0,48 m/s
0-0,014 s	0,0068 m	0,49 m/s

A szimulációs eredmények a jelenlegi szimulátor használatával még jelentősen eltérnek a mért értékektől, amely többek között a TVD és a non-reflektív peremfeltétel hiánya, valamint a szimulációban jelenlévő egyetlen szemcse (szemben a mérésben jelen lévő 11000 db-bal) az oka. A modellben definiált bemeneti gázsebesség értékadása sem volt pontos, ugyanis egy feltételezésen, és nem mérésen alapult, ez pedig nagyban befolyásolta a számított áramlási mező tulajdonságait, ebből következően a szemcse pozícióváltozását. A szemcse mozgását befolyásoló erők számításán is fejleszteni kell még, ezért a szimulációs eredményeket nem tartottam érdemesnek bemutatni.

Összefoglalás

Az esettanulmányban bemutatott modell alkalmas hasonló rendszerek részletes áramlástan vizsgálatára. Fontos fejlesztési feladatok a modell megoldómódszerét kiegészíteni TVD-vel és a kimeneten non-reflektív peremfeltételt definiálni. A további modellvalidálást támogatják a nyomásszenzorokból gyűjtött mérési adatok és a szimulációból nyert értékek összehasonlítása. A modellben mindenképpen szükség lenne több szemcse együttes mozgását kezelni, ezzel együtt egymással és a berendezés falával történő ütközéseiket is modellezni. Erre a fejlesztésre leginkább a diszkrét elem módszer ütközési modelljeit lehetne felhasználni.

4.4. Adszorpciós gáztisztító rendszer modellezése

Környezetre és egészségre ártalmas szennyezett gázok kerülnek ki számos vegyipari technológiából, amelyeket a légszennyezés elkerülése érdekében tisztítani kell. Szerves oldószereket használó eljárások során felmerülhet ez a probléma, például ioncserélő gyanta duzzasztásakor a folyadékkal történő kezelés során klórozott szénhidrogének szabadulhatnak fel [104], hasonlóan szennyező gáz termelődik szintézis gáz pirolízissel történő előállítása során [105]. Minden érintett technológia esetében szükség van a káros szennyezőanyagok megkötésére legfőképp az üvegházhatású gázok kibocsátásának csökkentése érdekében. Gyakori gáztisztítási technika a fixágyas adszorber, amellyel a nemkívánatos komponenseket egy porózus anyag (pl. aktív szén) megköti. A fixágyas adszorberek töltetei azonban egy idő után telítődnek, ezért regenerálni kell őket, ez pedig időszakos üzemleállással, egyúttal gazdasági veszteséggel jár. Egy gyakran alkalmazott megoldás, hogy párhuzamos fixágyas oszlopokat helyeznek egymás mellé, és amíg az egyiket regenerálják, a másik oszlop tovább tud működni, de ehhez kétszer annyi berendezés kell. Egy másik megoldás, ha mozgóágyas adszorberágyat használunk, ahol a friss adszorberszemcséket folyamatosan táplálják a rendszerbe. Ez utóbbi a leghatékonyabb a felsorolt három megoldás közül, de modellezési szempontból a legtöbb kihívást is ez jelenti. Az adszorpciós gáztisztító rendszer modellezési esettanulmányom célja az adszorberszemcsén létrejövő fizikai folyamatok részletes modellezése, amely támogatja a teljes berendezés technológiafejlesztését például az optimális működtetési paraméterek megválasztásában.

Adszorbensként sokféle termék áll rendelkezésre, melyek anyagi tulajdonságaiban valamelyest eltérnek egymástól, de közös bennük, hogy átmérőjük 0,5-10 mm közötti, hőmérsékletre stabilak, és kis átmérőjű pórusaik vannak, amelyek a nagy összterületű aktív felületet biztosítják. Néhányat ezek közül a 4.7. táblázat ismertet [97]. Egy csoportosítás szerint az adszorbensek nagy része három csoportba sorolható: az oxigéntartalmú vegyületekébe, amelyek tipikusan hidrofílek (vízmegkötők) és polárosak, például a szilikagél és a zeolitok; a szénalapú vegyületekébe, amelyek tipikusan hidrofóbok (víztaszítók) és apolárosak, például az aktív szén és a grafit; végül a polimeralapú vegyületek

csoportjába, amelyeknek lehet poláros vagy apoláros funkcionális csoportjuk is a porózus polimer mátrixban [106]. Adsorbens anyag alkothatja az egész szemcsét, vagy csak adsorbens réteggént beboríthatja egy hordozószemcse felületét.

4.7. táblázat. Adsorbens anyagok és tulajdonságaik [97]

Adsor-bens	Adsorbens max. regenerálási hőmérséklete [°C]	Aktív felület a_p [m ² /g]	Szemcse-átmérő d [mm]	Átl. pórus-átmérő d_p [nm]	Belső porozitás ϕ [%]	Látszólagos sűrűség ρ [kg/m ³]	Hővezetési tényező λ [W/(m.K)]	Fajhő c_p [kJ/(kg.K)]
Aktív Al ₂ O ₃	500	300...360	2...10	2...5	25 ...35	800	0,09...0,1	0,88...0,92
Szilika-gél	400	300...800	1...5	2...4	35...50	700	0,09...0,1	0,92...0,95
Molekula-szita	600	600...1100	1...5	0,3...1,2	30 ...55	700...1000	0,04...0,05	0,8...0,92
Aktív szén	150	600...1500	1...4	0,5...7	50...70	300...600	0,175...0,28	0,84

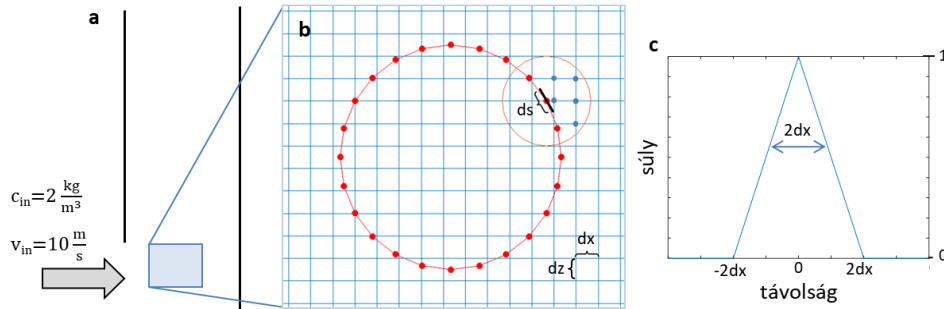
Az adszorpciós gáztisztító oszlopot vizsgálhatjuk mikro- és makroszinten. Technológiafejlesztés szempontjából érdekesebb a makroszint (a teljes ágy, berendezés) vizsgálata, ám ahhoz ismernünk kell az adszorberszemcsék szintjén végbemenő folyamatokat. Ezek ismeretében lehet például optimális oszlopmagasságot vagy gázáramot megadni.

Módszerek és eszközök

A következőkben bemutatandó esettanulmányban egyetlen, nem-mozgó szemcsére alkalmaztam a részletes adszorpciós modellt a folyamat részletesebb megértése érdekében. Az IBM módszernek megfelelően egy nagyságrenddel kisebb hálóméretet használtam a gáz tulajdonságainak számításához, mint amekkora a szemcse. Mivel gáz-szilárd rendszerről van szó, a modellegyenletek a folytonossági, a komponens-, a momentum-, valamint az energiaegyenletekből állnak. Az egyenletek parciális differenciálegyenlet-rendszert alkotnak, amelyet a 2.4.4. alfejezetben ismertetett MacCormack módszerrel oldottam meg. A megoldásban TVD technikát is alkalmaztam, és a kilépő peremen non-reflektív peremfeltételt definiáltam. A gáz-szilárd kölcsönhatás modellezéséhez a direkt numerikus szimulációs módszerek közül az immersed boundary módszert alkalmaztam, amelynek általános bemutatása a 2.3.2. alfejezetben található.

A részecske felületén létrejövő adszorpciós folyamatok vizsgálatához egy kétdimenziós modellt alkalmaztam, amely egy téglalap alakú számítási

tartományból áll oldalsó bemenettel és a tetején lévő kimenettel. Az adszorbens szemcse az immersed boundary modellezési megközelítés szerint egy nagyságrenddel nagyobb, mint a gáz számítási hálójá. A szemcse 3,2 mm átmérőjű, a gáz számítási hálójának rácsszélessége 0,4 mm. A modellezett áramlási tartomány, valamint a lagrange-i és euleri számítási pontok közötti interpolációhoz használt függvény a 4.25. ábra látható.



4.25. ábra. a) A gáztisztító oszlop oldalsó bemenettel. b) A szemcsét leíró lagrange-i pontok és a fluid euleri pontjai a rácsszélességgel, $ds=2,61 \cdot 10^{-4}$ m, $dx=dz=4 \cdot 10^{-4}$ m. c) Interpolációs függvény, mely a távolság alapján súlyt (egy 0 és 1 közötti szorzót) rendel az egyes értékeknek.

Az alábbi áramlási egyenletekkel írtam le a vizsgált rendszert (4.27-4.31. egyenletek).

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m}{\rho} \rho_g \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n}{\rho} \rho_g \right)}{\partial z} = 0 \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m}{\rho} c \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n}{\rho} c \right)}{\partial z} = R \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m^2}{\rho} + p \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n \cdot m}{\rho} \right)}{\partial z} = F_x \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m \cdot n}{\rho} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n^2}{\rho} + p \right)}{\partial z} = F_z \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{m}{\rho} (\rho E + p) \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{n}{\rho} (\rho E + p) \right)}{\partial z} = 0 \quad (4.31)$$

ahol ρ_g a nemszennyező gázelegy sűrűsége, c a szennyező gázkomponens tömegkoncentrációja, ρ a teljes tömegkoncentráció ($\rho = \rho_g + c$). m és n a momentum intenzív megfelelőjének x és z irányú összetevője. R a szennyező komponensre vonatkozó nyelőtag, amely a komponens adszorpciójának köszönhető, p a

nyomás, amelyet az ideális gáztörvényből számítunk, F_x és F_z a body force x és z irányú összetevője, amelyek az immersed boundary alapján a virtuális peremet kialakítják, és E a belső- és a mozgási energia összege.

A szennyező gázösszetevő megkötési folyamatát egyetlen szemcsén mutatom be. A szemcse felületét diszkretizáltam, és a 4.32. egyenlettel leírt elsőrendű kinetika alapján számítottam a komponensátadást a felületi elemre és a felületi elem telítettségi fokát (c_s). Feltételezem, hogy egyenletes koncentrációmező jön létre a szemcse adszorberrétegén belül a gyors diffúziónak köszönhetően.

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = k \cdot ds \cdot (c - c_0) \quad (4.32)$$

ahol c_s [kg/m³] a szennyező gázösszetevő koncentrációja a szemcse felületelemén, k [m²·s⁻¹] a komponens átadási együttható, ds [m²] a felületi elem területe, c [kg/m³] a szennyező gázösszetevő koncentrációja a gázfázisban és c_0 [kg/m³] a szennyező gázösszetevő egyensúlyi koncentrációja a szilárd felületen, amely a következő összefüggés alapján számítható: $c_0 = bc_s$ [107], ahol b egy konstans.

A 4.28. egyenletben lévő R forrástagot a 4.33. egyenlet alapján számítom.

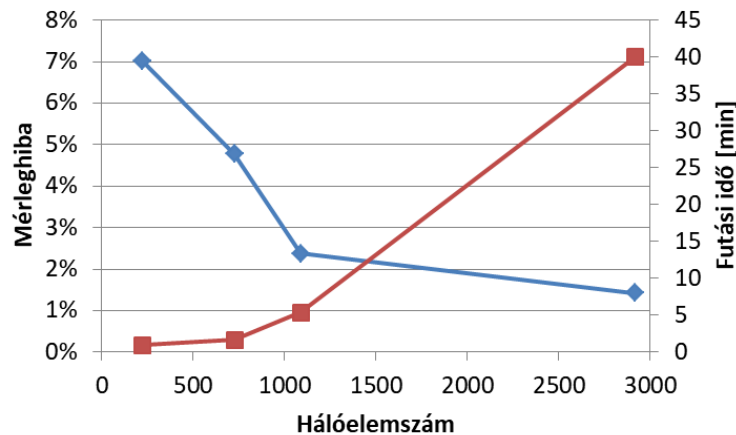
$$R_{i,j} = - \sum_{n=1}^{n=N} k \cdot ds \cdot (c_{i,j} - c_{0,n}) \quad (4.33)$$

ahol N az i,j számítási rácspont közelében lévő felületi elemek száma, n ezek indexe.

A 4.27-4.31. egyenletek megoldásához a másodrendű pontosságú TVD-MacCormack módszert [108] alkalmazva írtam programot. A TVD technika alkalmazása során a kétlépéses MacCormack módszer egy harmadik lépéssel egészül ki, amelyben egy disszipációs tag segítségével a numerikus megoldásban jelentkező oszcilláció kerülhető el. A kilépő peremnél non-reflektív numerikus peremfeltételt alkalmaztam. A számításhoz a programkódot MATLAB környezetben írtam és futtattam.

A gáz-szilárd kétfázisú rendszer fáziskölcsönhatásainak leírására az immersed boundary módszert használtam. Ennek megfelelően a 4.27-4.31.

egyenleteket a gázfázishoz tartozó, időben állandó, 0,0004 m-nkénti rácspontokon számítom, a szilárd fázis pedig virtuális peremként jelenik meg. Az alkalmazott hálófinomság választását hálófüggetlenségi vizsgálattal támasztom alá (4.26. ábra), amelyben a tömegmérlegre mérleghibát számítottam.



4.26. ábra. Hálófüggetlenségi vizsgálat.

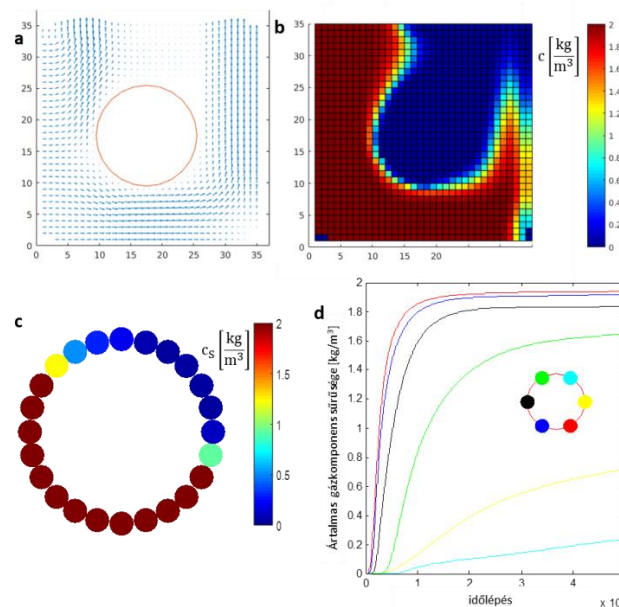
A megadott geometriában (amely a gáztisztító berendezés egy kiválasztott, szűkített tartománya, amelyben csak az egyetlen szemcse, és annak közvetlen környezete szerepel) 2916 hálóelemet jelentő 0,0002 m-es rácsszélességű háló nem ad sokkal pontosabb eredményt, mint az 1089 hálóelemet eredményező 0,0004 m-es rácsszélességű számítási háló alkalmazása, ezért az utóbbi használata mellett maradtam. A szemcse méretét egy átlagos aktívszén adszorber részecskét alapul véve 3,8 mm átmérőjűre vettem [97].

A fáziskölcsönhatás a különböző (euleri és lagrange-i) rácspontokon számított változók értékének átadásával is jár, amelyhez interpolációs függvényt kell használni. Esettanulmányomban egyszerű háromszögfüggvényt alkalmaztam interpolációs függvényként (4.25.c ábra). Ennek használata során a távolság függvényében lineárisan csökken az a súly, amellyel a másik fázis rácspontjánál lévő értéket figyelembe veszem. A számítási algoritmus minden időlépésben sorra veszi a lagrange-i pontokat, és kiválasztja azokat az euleri pontokat, amelyek egy bizonyos távolságon belül helyezkednek el (lásd 4.25.b ábrán a narancssárga körön belüli pontok). A momentumegyenletbe beépített direct forcing tag a gázfázist a szemcse kikerülésére kényszeríti. A fáziskölcsönhatás az

impulzusátadáson kívül ebben a tanulmányban komponensátadást is magában foglal.

Eredmények és értékelés

A 4.27-4.31. egyenletekkel megadott dinamikus modellt TVD-MacCormack módszerrel oldottam meg egy MATLAB környezetben fejlesztett kóddal. A kilépő felületen non-reflektív numerikus peremfeltételt alkalmaztam. A szennyező gázkomponens sűrűségét a bemeneten 2 kg/m^3 -re állítottam. A beáramló gáz többi komponensét átlagos összetételű levegőnek tekintjük. A gáz sebességét a bemeneten 10 m/s -ra állítottam. A tömegátadási állandó $k=1 \cdot 10^8 \text{ m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, a b szorzó pedig $1,1$. A számítás időlépése a CFL kritériumnak megfelelően $2 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ körül változott. Az $5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ -os szimulációs időpillanatban a szemcse körüli sebességi mezőt mutatja a 4.27.a ábra, a szennyező komponens koncentrációját pedig a 4.27.b ábra. Az ábra c részében a szemcse felszínének telítődését mutatom be. A d ábrán kijelöltem hat pontot a szemcse felületén, és azok telítődési görbéjét ábrázoltam, amelyen jól látszik, hogy a különböző felületi pontokon eltérő ütemben megy végbe az adszorpció.



4.27. ábra. a) Sebességi mező az adszorberszemcse körül. b) A szennyező gázösszetevő sűrűsége az áramlási mezőben. c) Az adszorberszemcse felületének telítettsége 50 000 időlépés elteltével. d) A szemcse bizonyos pontjainak szaturációs görbéi.

A szimulációs eredményekből látható, hogy a modell alkalmas a szemcse felületi pontjain az adszorpció folyamat számítására, ezáltal kiszámíthatjuk az adszorberszemcse aktív életidejét. Ez a módszer több részecske számítása esetén hozzájárulhat a gáztisztító oszlop optimális működési paramétereinek meghatározásához.

Összefoglalás

Direkt numerikus szimulációt alkalmaztam egyetlen adszorberszemcsén végbemenő adszorpció folyamat szimulációjára, melyben a szennyező komponens megkötését egy elsőrendű kinetikával írtam le, valamint a teljes áramlási mezőt dinamikusán számítottam. A gáz-szilárd fáziskölcsönhatást immersed boundary és direct forcing módszerekkel modelleztem.

Feltételeztem, hogy az adszorbens anyag a hordozószemcse felületén egy réteget alkot, amelyben a diffúzió gyors. A tanulmány eredménye, hogy a kifejlesztett modell felületelemenként számítja a komponensátadást, így a kétdimenziós modellben a szemcse körvonala mentén nyomon tudjuk követni a telítődés mértékét. A részletes telítettségi adatok felhasználásával pontosabban meg tudjuk határozni a teljes szemcsére vonatkozó szaturációs időt, amely folyamatfejlesztési kérdésekben adhat iránymutatást.

További modellfejlesztési feladat e témakörben az adszorberszlopot több szemcsével feltölteni, valamint szimulálni a szemcsék mozgását, és ütközéseiket egymással és a berendezés falával. Ez a diszkrét elem módszer egyidejű alkalmazásával érhető el. A kibővített modell alkalmas lehet egy adszorpció töltet működésének szimulációjára, és ennek segítségével az optimális működtetési paraméterek beállítására.

4.5. Szilárd szemcse ülepedési trajektóriájának meghatározása newtoni folyadékokban

Szedimentációnak nevezzük azt a jelenséget, amely során a közeg sűrűségénél nagyobb sűrűségű szilárd testek a folyadékkal teli edény aljára ülepednek. Ez a folyamat az ipar és a természettudomány számos területén előfordul, például geológiai-biológiai rendszerek esetén [109], szennyvíztisztításnál [110], vagy tejtermékek előállítása során [111]. Az ülepetést leggyakrabban elválasztáshoz használják egy feldolgozó folyamat részeként. A klasszikus szedimentáció kizárólag a gravitációs erőt használja fel a szétválasztódáshoz, ezt a folyamatot azonban különféle technikákkal (pl. centrifugálással [112], mágneses erővel [113], kémiai úton [114], ultrahanggal [115] stb.) gyorsítani is lehet. Ellenerőként hat a felhajtóerő és a közegellenállási erő, a szilárd testek pozícióváltozását, ülepedését a ráható erők eredője határozza meg. Az ülepedés során a test kezdeti sebessége folyamatosan csökken, majd egy idő után a test megszűnik gyorsulni, amikor a ráható erők kiegyenlítik egymást. A testek süllyedésének leírása, pontosabban a közegellenállás számításához használt összefüggés kiválasztásához az áramlás Reynolds számát (lásd 3.1.3. alfejezet, 3.5. egyenlet) meg kell határoznunk, ez alapján két fő tartományt különíthetünk el. Abban az esetben ha $Re \ll 1$, a Stokes törvény (4.34. egyenlet) érvényes, magasabb Re számú rendszerek esetén pedig a Rayleigh-féle közegellenállási erő számítására használatos képletet (4.35. egyenlet) kell alkalmaznunk.

$$F_D = -6\pi\mu r v \quad (4.34)$$

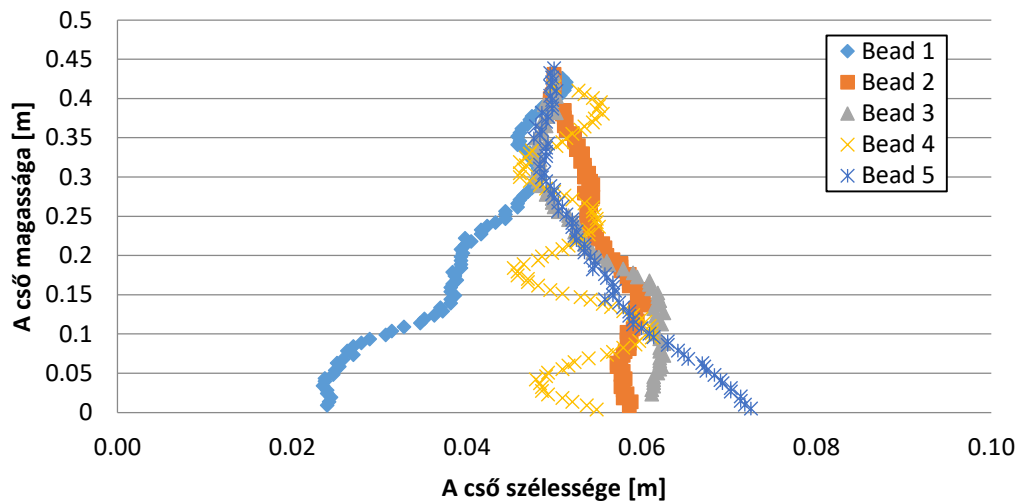
$$F_D = \frac{1}{2}\rho v^2 C_D A \quad (4.35)$$

ahol F_D a közegellenállási erő, μ a közeg dinamikai viszkozitása, ρ a közeg sűrűsége, v a közeg sebessége a testhez viszonyítva (tulajdonképpen a test sebessége), A a test vetületének területe, C_D a dimenziómentes közegellenállási együttható, amely főleg a test alakjától függ, gömb esetében 0,47.

Fontos megjegyezni, hogy az esettanulmányomban newtoni közegekben vizsgáltam a szilárd szemcsék ülepedését. Egy közeg akkor nevezhető newtoni

folyadéknak, ha igaz rá, hogy a sebességgradiens egyenesen arányos a nyírófeszítéssel, ahol az arányossági tényező a dinamikai viszkozitás.

Üledés közben a szilárd szemcsékre ható erők eredője főként a süllyedés irányába mutat, azonban kisebb mértékben oldalirányba is hatnak, ezzel eltéríthetik az üledő testet. A mérések a University College Cork Folyamat- és Vegyészmérnöki Tanszékének laboratóriumában készültek. A mérési adatokból látszik, hogy az üledés nem egyenes vonalú (4.28. ábra, [116]).



4.28. ábra. Öt, egyenként 5,6 mm átmérőjű nylon golyó üledési trajektóriája vízben. Az x tengelyen a cső szélessége, az y tengelyen a magassága szerinti pozíció látható. A berendezés egy 10 cm átmérőjű, 50 cm magas cső volt.

A kétfázisú rendszer részletes áramlási modellje segítségével nyomon követhető a test mozgása. A kétfázisú rendszerek modellezési lehetőségei közül a két-folyadék módszer (másnéven Euler-Euler megközelítés, TFM) alkalmazásával is lehetséges a szedimentációs folyadék-szilárd rendszert modellezni, például Noetinger munkájában a szedimentációs edény alakjának hatását vizsgálta TFM-mel [7]. Ezt a megközelítést akkor szokták használni, ha egy szemcsesokaság üledését akarják modellezni, de a szemcsesokaság modellezéséhez használatos az Euler-Lagrangian megközelítés is [117]. Az Euler-Euler megközelítés előnye a kisebb számítási igény mellett, hogy az üledő testek alakja lehet szabálytalan is, például tojás-héj törmelékek [118], mivel a módszer csak az egyes számítási cellák kitöltöttségi hányadát veszi figyelembe (lásd 2.1. alfejezet). A diszkrét elem módszer is alkalmazható a szedimentáció modellezéséhez, de sokkal

időigényesebb mint a TFM. Ebben az esetben egyenként számítjuk a szemcsék mozgását és kölcsönhatásukat az őket körülvevő közeggel, a fallal és egymással a rájuk ható erők alapján [119]. Az előbbi két térfogatátlagolt áramlási egyenletet használó módszer mellett a szedimentációt is lehet direkt numerikus szimulációs módszerrel modellezni. CFD szoftverekkel megadott body-fitted modellek is lehetséges eszközök lehetnek, ám az elmozdulás után üresen maradt térrész kitöltése miatt is problémás a módszer a nagy számításigény mellett. Ez a nehézség áthidalható az Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE, önkényes lagrange-i/euleri) technika alkalmazásával [120] (ezen az elven működik az úgynevezett moving mesh (mozgó számítási háló) módszere is), de kutatási tevékenységem nem ebben az irányvonalban haladt, hanem inkább az időben állandó euleri számítási hálót alkalmazó direkt numerikus módszer alkalmazása mellett döntöttem. Az immersed boundary módszer használata előnyös, mert a számítási hálót nem kell minden időlépésben, minden geometriaváltozásnál újradefiniálni, és üres terek sem maradnak a virtuális peremkezelésnek köszönhetően (2.3.2. alfejezet), azaz a szimuláció teljes ideje alatt minden számítási tartomány értéket kap. Egy speciális fajtája az Immersed Boundary modellezési megközelítésnek a Level Set módszer (3.1.1. alfejezet), és az ehhez hasznoló Phase Field módszer. Ezek lényege, hogy a teljes geometria minden számítási pontjában értelmezett egy 0 és 1 vagy -1 és 1 közötti értékkészletű függvény, amely az adott számítási cellának a fluid/szilárd kitöltöttségi arányát adja meg. Ez hasonlít a térfogatátlagolt módszerek térfogati hányadához (ϵ), de itt nagyságrendnyi különbségek vannak, egy számítási cellában nem hogy egynél több szemcse esik, de egy szemcse lefed több számítási cellát is, míg némelyeknek csak egy részét (ezek adják a köztes értékeket). A logika itt is ugyanaz, viszont mivel a számítási háló Level Set módszer esetén a szemcsétől egy nagyságrenddel kisebb, lesznek olyan cellák, amelyekben a függvény a szélső értékeit veszi föl, jelezve, hogy az egyik vagy a másik fázis van jelen a számítási cellában, továbbá lesznek a fázishatár számítása szempontjából olyan cellák, amelyekben mindkét fázis jelen van.

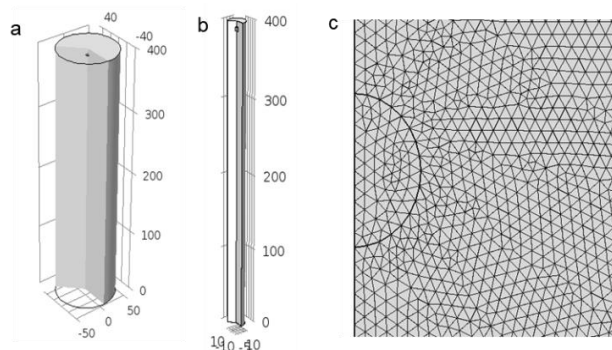
Ebben az esettanulmányban newtoni folyadékban ülepedő egyetlen szilárd merev szemcse szedimentációjának modellezését mutatom be. Célom volt

fehérdoboz (a priori) modellel nyert szimulációs vizsgálatok alapján jobban megérteni a fizikai mérésekben tapasztalható sebességfluktuáció okait.

Modellezés Level-Set módszerrel

A szedimentációs rendszert először Level Set módszerrel kezdtem modellezni COMSOL Multiphysics programcsomag segítségével, ezért a bemutatandó eset kapcsán is ezt a tanulmányt ismertetem először. A módszer általános elméleti bevezetője a 3.1.1. fejezetben található.

Különálló testek mozgásának modellezésére fluidumban jobban alkalmazható a Level Set módszer az Euler-Euler típusú módszerekhez képest, mivel azok inkább szemcsetőmegek mozgásának modellezésére alkalmasak. A Level Set módszer további előnye, hogy könnyen kezelhetők az alakváltozások, az egyesülések és a szétválások [121]. Ez nyilvánvalóvá teszi, hogy valójában inkább olyan kétfázisú rendszerek modellezésére alkalmas, ahol a diszpergált fázis nem szilárd, tehát buborékos rendszerek, emulziók stb. esetében. A Level Set és Phase Field módszereket interface tracking (azaz érintkező felület követéses) módszereknek is nevezik. COMSOL Multiphysics-ben létrehoztam egy 2D-tengelyszimmetrikus modellt egy egyszerű, henger alakú ülepítő berendezés leképezéséhez (4.29. ábra). A Level Set modellegyenletek hozzáadásakor egy mintapéldát vettem alapul, amellyel egy vízben lévő olajcsepp mozgását lehet szimulálni. A modellben meg kell adni mindkét fázis viszkozitását, tehát a szilárd szemcsét is folyadékként tudtam csak értelmezni, nagy viszkozitással közelítve a szilárd tulajdonsághoz.



4.29. ábra. a) A szedimentációs berendezés 2D-tengelyszimmetrikus geometriai modellje [mm]. b) A lecsökkentett méretű számítási tér. c) A háromszögekből álló hálózás egy részlete (metszet).

A program a fázishatár dinamikus változását a 4.36. egyenlettel írja le.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \Phi = \gamma \nabla \cdot \left(\epsilon_{ls} \nabla \Phi - \Phi(1 - \Phi) \frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|} \right) \quad (4.36)$$

ahol Φ a Level Set függvény, u a sebesség, γ a reinicializációs paraméter, ϵ_{ls} a fázishatár vastagságát megadó paraméter.

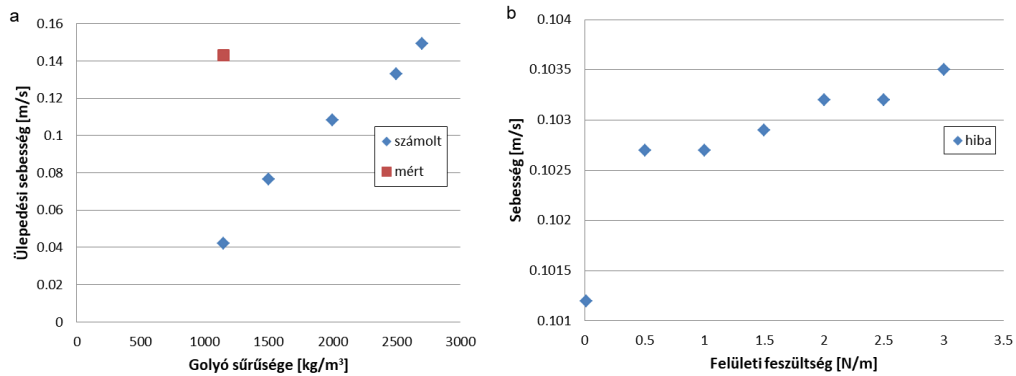
A reinicializációs paramétert tanácsos u -val egy nagyságrendben megadni, hogy a frissítés ne maradjon le a közeg mozgásától, ebben az esetben 0,1 m/s volt. A fázishatár vastagságát a maximális számítási hálóméret felére állítottam. A maximális hálóelem mérete a szemcse átmérőjének tized része (4.29. ábra). A 4.29. ábra b részében egy szűkített geometria látszik (a számítási idő csökkentése érdekében az átmérőt a negyedére szűkítettem), ezzel a hálóbeállítással 18279 domain hálóelemet és 999 peremelemet kaptam. Ez jóval kevesebb az eredeti 150246+1542 db hálóelemnél. A rendelkezésemre álló mérési adatok alapján választottam az anyagokat, melyek néhány jellemző tulajdonságát a 4.8. táblázatban foglaltam össze.

4.8. táblázat. Az alkalmazott anyagok anyagi tulajdonságai.

	Sűrűség [kg/m ³]	Dinamikai viszkozitás [Pa·s]	Térfogat [m ³]	Hőmérséklet [°C]
nylon	1114	“10”	1,08·10 ⁻⁷	25
víz	1000	0,0009	0,04	25
szilikon olaj	1000	0,6	0,04	25
paraffin olaj 1	827	0,11	0,04	25
paraffin olaj 2	890	0,23	0,04	25
gépölaj	850	0,32	0,04	25

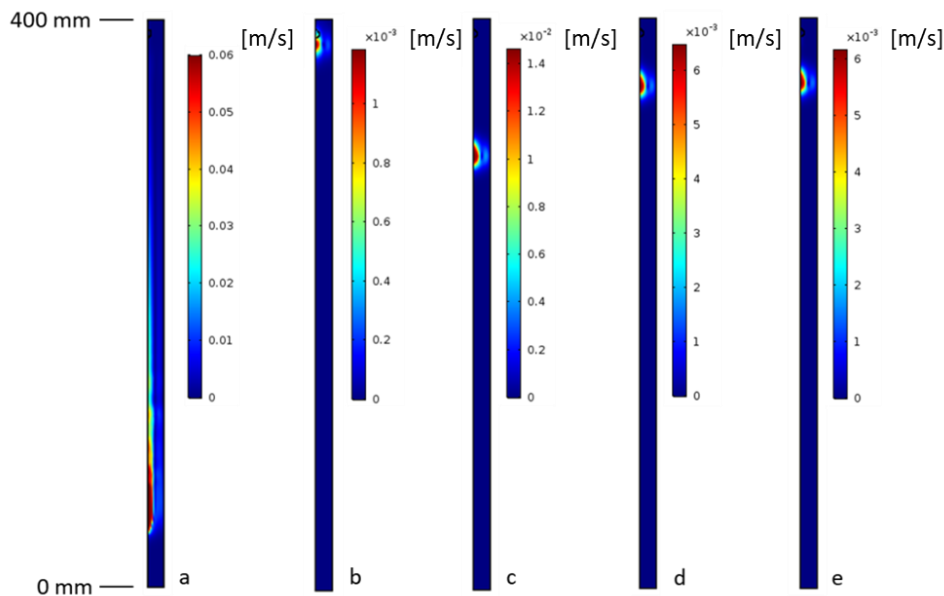
A 4.8. táblázatban felsorolt anyagokkal szimulációkat futtattam, melyekben az egyik fázis mindig a nylon volt, a közeg pedig a táblázatban felsorolt öt newtoni folyadék volt. Ha a golyó sűrűségét körülbelül 2700 kg/m³-re vennénk, akkor a mérési értéket kapnánk a modellből (4.30. ábra). A sűrűség változtatása

azonban nem jó irány, hiszen ezzel csak azt érjük el, hogy más anyagból készült golyók ülepedését szimuláljuk, de a keresett rendszer modellpontosításához nem járulunk hozzá. A felületi feszültséget a két fázis határán elhanyagolhatónak vettem, mert néhány értéket kipróbálva a mérési adattól egyre inkább eltérő sebességértékeket kaptam (4.30. ábra).



4.30. ábra. a) Kísérletek különböző sűrűségű kvázi-folyadékokkal, b) A felületi feszültség hatása a mért és a számolt ülepedési sebesség különbségére.

A szimulációt 6 s-ig futtattam 0,2 s-os időlépéssel. A kapott sebességprofilokat a 4.31. ábra mutatja.



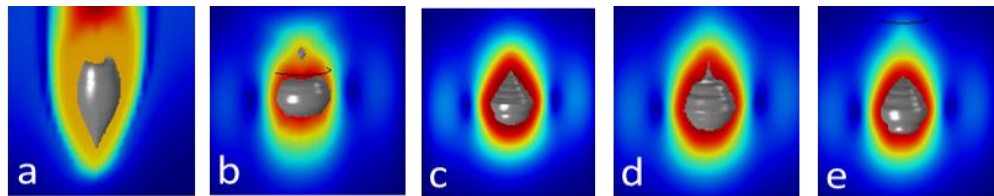
4.31. ábra. Sebességprofilok 6 s elteltével a szűkített tengelyszimmetrikus geometriában. Az első fázis a nylon golyó minden esetben, a második (a közeg) pedig a) víz, b) szilikon olaj, c) paraffin olaj 1, d) paraffin olaj 2, e) gépolaj.

A 4.9. táblázatban a számított sebességeredmények és a számításához szükséges idő szerepel. A szimulációk futtatásához egy 16 GB RAM-os személyi számítógépet használtam 2.66 GHz órajelű Intel Core i5 CPU-val.

4.9. táblázat. A számításához szükséges idő és a kapott szemcsesebességek a különböző közegekben.

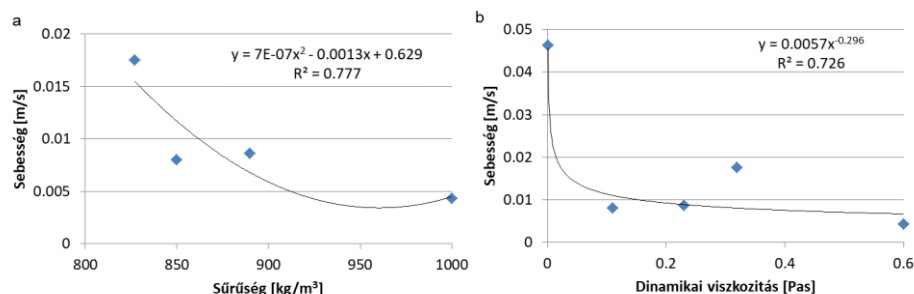
	Számítási idő [s]	u [m/s]
víz	5236	0,0463
szilikon olaj	318	0,0043
paraffin olaj 1	3073	0,0175
paraffin olaj 2	2181	0,0086
gépölaj	1846	0,008

Folyadék-szilárd rendszer modellezésére nem vált be a módszer, mert ahogy a 4.32. ábraán is látszik, a gömbként definiált szemcse különösen is a nagyobb sűrűségű közegekben alakját változtatta, egyes esetekben szét is vált.



4.32. ábra: Kváziszilárd szemcse ülepedése newtoni folyadékokban 2 s elteltével a) vízben, b) szilikon olajban, c) és d) különböző paraffin olajokban, e) gépölajban.

A deformáció, ahogy a sebesség is, függ a közeg viszkozitásától és a sűrűségétől. A 4.8. táblázat és a 4.9. táblázat adatai alapján két diagramot lehet felrajzolni (4.33. ábra).

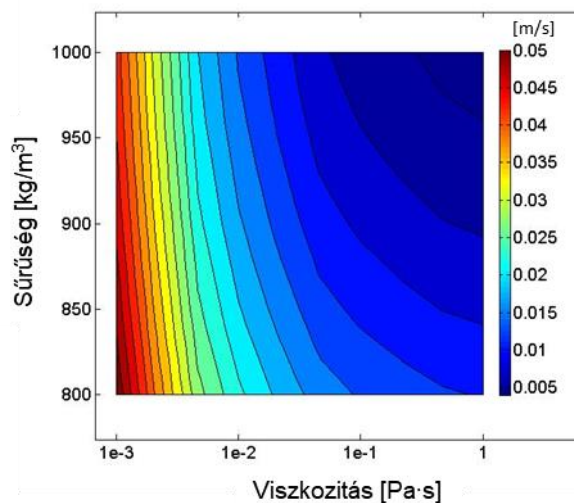


4.33. ábra: Ülepedési sebesség a) a sűrűség és b) a dinamikai viszkozitás függvényében.

A pontokra illesztett görbék alapján meghatároztunk egy olyan sebességösszefüggést, amely a sűrűséget és a viszkozitást is tartalmazza (4.37. egyenlet). Paramétereit (par(1)-par(5)) egy globális nemlineáris optimalizáló algoritmussal, a NOMAD-dal határoztuk meg [122].

$$u = \text{par}(1) \cdot \rho^2 + \text{par}(2) \cdot \rho + \text{par}(3) \cdot \mu^{\text{par}(4)} + \text{par}(5) \quad (4.37)$$

A szélsőértékkereső algoritmus célfüggvénye a számított értékektől való eltérés minimalizálása volt. Eredményül a paraméterekre rendre a következőket kaptuk: $1e-7$, $-2e-4$, $1e-3$, $-0,5$, $0,1$. A 4.33. ábra a és b részét egy felülettel is ábrázolhatjuk (4.34. ábra).

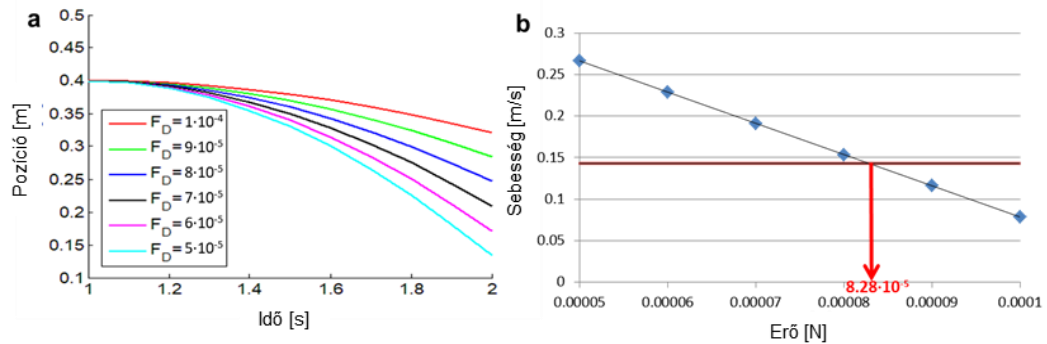


4.34. ábra. Az ülepedési sebesség a sűrűség és a viszkozitás függvényében. Alacsonyabb viszkozitásértékeknél nagyobb sebesség tud kialakulni, valamint kisebb mértékben, de a sűrűség növelése is csökkenti a sebességet.

Modellezés szemcsekövetéssel

A szemcse szedimentációjának modellezésére a COMSOL Multiphysics Particle Tracing (szemcsekövető) modellje is szóba került, mint lehetséges módszer. Létrehoztam a szedimentációs rendszer háromdimenziós CFD modelljét, és hat szimulációs kísérlet során különböző értékű, a közegellenállási erőt szimuláló tagot adtam a modellegyenletekhez. Illesztés során a $8,28 \cdot 10^{-5}$ N közegellenállási erő adódott megfelelőnek ahhoz, hogy a modellel számított ülepedési sebesség legjobban közelítse a mérésekből származó értéket (4.35. ábra).

A számítási idő 21 óra volt, ezt a hosszú időt főként a 3D geometria miatti nagyszámú hálóelem okozta.



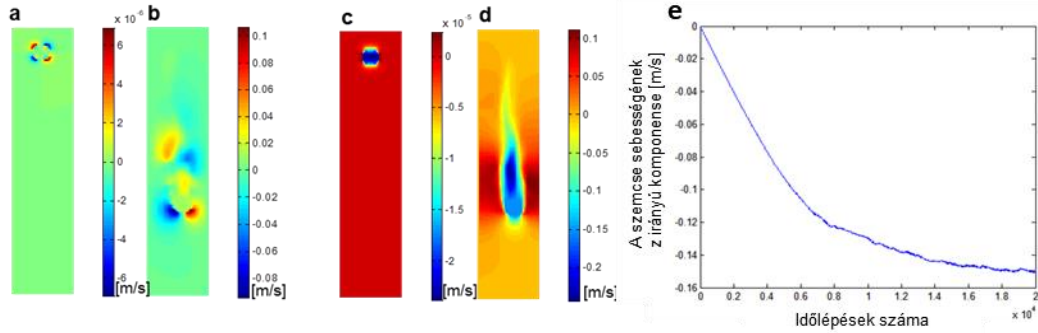
4.35. ábra. a) A szemcse pozíciója az idő függvényében a különböző beállított közegellenállási erőt imitáló erők (F_D [N]) hatására, b) A különböző nagyságú F_D erők hatása a sebességre.

A COMSOL Multiphysics segítségével végzett szedimentációs vizsgálatok hátránya az volt, hogy az alkalmazott módszereket nem igazán folyadék-szilárd kétfázisú rendszerek modellezésére találták ki. Kutatásomat ezért más irányban folytattam, saját fejlesztésű direkt numerikus szimulációs modellezési megközelítésen alapuló modellt fejlesztettem, amelyet a következőkben mutatok be. Az áramlási egyenletek és a fáziskölcsönhatás modellezése specifikusan összenyomhatatlan közegek és szilárd merev testek rendszerének modell leírására alkalmas, ezért a megoldástól jobb eredményt várhatunk.

Modellezés Immersed Boundary módszerrel

Az ülepítő berendezés kétdimenziós modellegyenleteinek megoldására egy MATLAB programkódot hoztam létre, melyben a 2.4.6. alfejezetben ismertetett SIMPLE módszert használtam. A fáziskölcsönhatás modellezését Immersed Boundary módszerrel alapuló direct forcing módszerrel végeztem háromszög alakú interpolációs függvényt használva. Az euleri rácsszélesség (hálóelemméret) 0,0005 m volt, amely az immersed boundary módszernek megfelelően egy nagyságrenddel kisebb az 5,9 mm-es golyótól. Egyetlen nylon golyóból és a vízoszlopból álló kétfázisú rendszer szimulációját 20000 időlépésig futtattam, ahol egy időlépés $2,5 \cdot 10^{-5}$ s volt. A testre ható erők körülbelül 16000 időlépés után egyenlítették ki egymást (4.36. ábra) körülbelül 0,145 m/s-os ülepedési

sebességet eredményezve, amely jó egyezést mutat az átlagosan 0,143 m/s-nak mért üledési sebességgel.



4.36. ábra. a-d) A közeg sebességének x (oldalirányú) és z (függőleges) irányú összetevője az első és az utolsó szimulált időlépésben ($2,5 \cdot 10^{-5}$ s és 0,5 s), e) az üledési sebesség változása az idő előrehaladtával a szimuláció szerint.

A 4.36. ábrán látható eredményeket izoterm inkompresszibilis közegre felírt áramlási egyenletek alapján kaptuk (4.38-4.40. egyenletek).

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (4.38)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} - \rho v \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial x} + f_x = 0 \quad (4.39)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} + f_z = 0 \quad (4.40)$$

ahol u és v az x és z irányú sebességkomponensek, t az idő, p a nyomás, ρ a közeg sűrűsége, f_x és f_z pedig a virtuális peremhez szükséges body force x és z irányú összetevője.

Később a momentumegyenleteket pontosítottam a viszkozus tag hozzáadásával, így a 4.39-4.40. egyenletek a 4.41-4.42. egyenletekre módosultak.

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + f_x \quad (4.41)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + f_z \quad (4.42)$$

ahol τ a nyírófeszültség.

Összefoglalás

Ebben az esettanulmányban szilárd merev szemcse ülepedését modelleztem newtoni folyadékokban. A modellezés és szimuláció célja, hogy az ülepedési sebességben mutatkozó fluktuációt meg tudjuk jósolni. COMSOL Multiphysics segítségével és egy MATLAB környezetben fejlesztett programmal is megpróbáltam leírni. A tanulmány fő eredménye, hogy létrehoztam szilárd-folyadék ülepedési rendszer szimulációjához egy olyan programkódot, melyet a továbbiakban a célok elérése érdekében szükséges továbbfejleszteni.

5. Összefoglalás

Dolgozatomban a kétfázisú rendszerek áramlásával foglalkoztam modellezési és szimulációs szempontból. Az irodalmi áttekintés fejezetében a tudomány ezen területének jelenlegi állását mutattam be. Törekedtem arra, hogy a már meglévő, felhasznált eredmények és módszerek jól elkülöníthetők legyenek az új, általam bevezetett módszerektől és eredményektől. A többfázisú rendszerek áramlásának modellezésében alapvető kérdés, hogy az egyes fázisok mozgását milyen részletességgel írjuk le. Az áttekintésben a modellezési megközelítések három alap típusát mutattam be, a két-folyadék módszert, a CFD-Diszkrét elem módszert és a direkt numerikus szimulációs módszereket. A modellegyenletek alkotta parciális differenciálegyenlet-rendszer megoldásához alkalmazható numerikus módszerek bemutatását követően a kutatásaimban alkalmazott módszereket és eszközöket ismertettem. A gyakorlati kutatómunkámat és az elért új tudományos eredményeket négy esettanulmányon keresztül mutattam be.

Elsőként egy kétlépéses biomassa elgázosító reaktort vizsgáltam az áramlási viszonyainak szempontjából. Az összetett geometriájú berendezés két bemenettel és egy kimenettel rendelkezik, és hidrodinamikai jellemzését tartózkodási idő analízis módszerével végeztem. COMSOL Multiphysics CFD szoftver segítségével háromdimenziós áramlási modellt készítettem, mellyel jelölőanyag impulzuszerű bevezetésére adott válaszból tartózkodási idő eloszlás görbéket nyertem. Vizsgáltam a bemeneti tömegáramok hatását a tartózkodási idő eloszlásfüggvényre. A számításigényes 3D-s CFD modell mellett létrehoztam a berendezés cellás modelljét is, amely az ideális áramlási modellek kombinációjából és a megfelelően megválasztott paramétereiből áll. A CFD és a cellás modell alapján nyert RTD görbék jellegükben megegyeztek.

A második esettanulmányban egy többfuratos jetkeverő példáján mutattam be egy új módszert a keverőteljesítmény értékelésére. Fáziselemeket jelölő szemcsék trajektóriáját követtetem, amelyek az előzetesen kiszámított stationárius sebességmező szerint haladtak. A keverő eszköz két bemeneti pereméről induló jelölőszemcséket megkülönböztető jelöléssel láttam el, amely a szimuláció végéig megmaradt. A berendezés kimeneti peremén Poincaré metszetként elmentettem a szemcsék pozícióját, és a felületet kisebb mezőkre

osztva lokális lefedettségi és kevertégi mértékeket definiáltam. A berendezés keverési teljesítményét a teljes kilépő felületre összegzett metrikákkal jellemeztem.

A harmadik alkalmazási példában egy laboratóriumi méretű, kvázi-kétdimenziós fluidizációs berendezés modelljét és szimulátorát mutattam be. Immersed boundary módszerrel modelleztem a gáz- és a szilárd fázis kölcsönhatását, melynek segítségével egy szilárd szemcse mozgását szimuláltam. A szimulációs eredményeket mérésekkel validáltam, azonban a modell még fejlesztésre szorul annak érdekében, hogy egy teljes szemcsesokaságot legyen képes kezelni, melyben a szemcsék egymással és a berendezés falával történő ütközését (szilárd-szilárd kölcsönhatás) is számítjuk a gáz-szilárd kölcsönhatás számítása mellett.

Adszorpciós gáztisztító berendezés szemcse szintű modelljét ismertettem a negyedik esettanulmányban. A folytonossági, momentum- és energiamegmaradási egyenletek mellett ebben az esetben komponensmérleget is számítottam, amellyel a szennyező gáz koncentrációjának változását egy elsőrendű kinetika szerint számítja a modell. A tanulmány fő eredménye, hogy az adszorbens szemcse telítettségi állapotának részletes, felületi elemenkénti jellemzése lehetővé vált.

Végül egy szilárd szemcse newtoni folyadékban történő ülepedésének modell-felépítését és szimulátorát mutattam be, mellyel a szemcse ülepedési trajektóriája és a terminális sebesség írható le. A folyadék-szilárd kétfázisú rendszert COMSOL Multiphysics-ben level set módszerrel és MATLAB-ban SIMPLE módszerrel megvalósított immersed boundary módszerrel modelleztem. A modellegyenletekben a gáz-szilárd rendszerek esetében még elhanyagolható viszkozitási tagokat ebben a folyadék-szilárd rendszert modellező esettanulmányban meghagytam és számítottam.

A dolgozatban kifejtett eredmények tömör, lényegre törő megfogalmazását az Új tudományos eredmények (tézisek) fejezetben mutatom be.

Köszönetnyilvánítás

Elsősorban témavezetőimnek, dr. Egedy Attilának és dr. Ulbert Zsoltnak szeretnék köszönetet mondani a négy év során nyújtott szakmai segítségért. Attila mindenben támogatott, hogy időben elkészüljek, sok ötlete és a gyakori konzultációk lehetővé tették a folyamatos haladást. Zsolt alaposságával nagyban hozzájárult a munkáim minőségének javulásához, és a megoldómódszerek implementálásában is rengeteget segített. Rajtuk kívül hálás vagyok még a Pannon Egyetem Folyamatmérnöki Intézeti Tanszékének munkatársainak és hallgatóinak valamint családomnak és barátaimnak, hogy segítettek idáig eljutni.

Új tudományos eredmények (tézisek)

1. Numerikus áramlástani és cellás modellen alapuló tartózkodási idő eloszlás analízist alkalmazó vizsgálati módszert fejlesztettem ki összetett geometriájú berendezések hidrodinamikai viselkedésének feltárásához. A módszer által meghatározott heurisztikus cellás modellel generált tartózkodási idő eloszlás függvény jól közelíti a részletes CFD modellel kapott tartózkodási idő eloszlás függvényt.

- a) Biomassza elgázosító reaktor háromdimenziós CFD modelljének megalkotásával szimulációs eszközt készítettem, amely alkalmas több-bemenetű rendszerek tartózkodási idő vizsgálatára.
- b) Megmutattam, hogy az ideális áramlású egységek kombinációjával létrehozott cellás modell alkalmazásával a részletes CFD modellel kapott hidrodinamikai viselkedés reprodukálható, ezáltal jelentősen kisebb számítás igényű eszközt kapunk a tartózkodási idő eloszlás analízisen alapuló vizsgálatokhoz.

Kapcsolódó publikációk: 6., 10., 18.

2. Folyamatos üzemű keverők teljesítményének értékeléséhez egy többszempontú kevertségi mértéket definiáltam, és ennek felhasználásával egy értékelési módszert dolgoztam ki. A kifejlesztett módszer előnye, hogy a hagyományos, komponensmérleg számításán alapuló szimulációs vizsgálatokkal szemben a számításokhoz csak a stacionárius sebességmezőt kell felhasználni.

- a) Keveredési metrikákat dolgoztam ki a kevertség meghatározására, amelyek alkalmasak statikus és jet keverők minősítésére.
- b) Definiáltam a lokális lefedettségi érték fogalmát, amelyet a teljes kilépő felületre értelmezve minősíthetővé válik a keverő.
- c) Olyan számítási eljárást dolgoztam ki, amely alkalmas a fáziselem jelölőszemcsék pozícióadatai alapján a keverési teljesítmény

meghatározására az áramlástan szimulációval kapott stacionárius sebességmező felhasználásával.

Kapcsolódó publikációk: 1., 13.

3. Kétfázisú rendszerek részecske szintű áramlási modellezéséhez a direkt numerikus szimulációs modellezési megközelítésen alapuló immersed boundary módszert alkalmazva modelleket fejlesztettem ki, amelyekkel a fázisok közötti kölcsönhatásokat írtam le különböző kétfázisú műveletek esetében, mint a fluidizáció, az adszorpció és az ülepedés.

- a) Létrehoztam egy fluidizált szemcsét tartalmazó kétfázisú rendszer szimulátorát, amelyben a gáz- és szilárd fázis kölcsönhatását immersed boundary módszerrel számítottam. A számítási algoritmus alkalmas a szilárd szemcse mozgásának számítására a részecskét körülvevő áramlási mező tulajdonságait felhasználva.
- b) Egy részecske szintű számítási modellt fejlesztettem ki az adszorbens szemcse felületén végbemenő adszorpciós folyamat szimulációjára. Az adszorbens részecskét és a megkötendő komponenst tartalmazó kétfázisú rendszer áramlástan modelljét készítettem el az immersed boundary módszeren alapulva. Az áramlástan modellt kiegészítettem a megkötendő komponensre vonatkozó komponensmérleggel és az adszorpció folyamatát leíró elsőrendű kinetikával. A kidolgozott módszer lehetővé teszi a szennyező komponensekkel való telítődés mértékének meghatározását a szemcse különböző felületi elemein.
- c) Szilárd merev szemcse newtoni folyadékban történő ülepedésének vizsgálatára egy részecske szintű számítási modellt hoztam létre, amelyben az immersed boundary módszert alkalmaztam. A létrehozott szimulátor alkalmas a szilárd szemcse álló folyadékban való mozgásának számítására a részecskét körülvevő áramlási mező tulajdonságait felhasználva.

Kapcsolódó publikációk: 3., 7., 8., 9., 11., 12., 14., 15., 16., 17., 19., 20.

New scientific results (theses)

1. I developed a new method based on residence time distribution analysis using computational fluid dynamics and a compartmental model to study the hydrodynamic behavior of the equipment with complex geometry. The residence time distribution curve obtained by using the heuristic compartmental model is in good agreement with the curve obtained by the detailed CFD model.

- a) A three-dimensional CFD simulator of a biomass gasification device is developed, which is suitable for studying residence time distribution of systems with multiple inlets.
- b) Using a compartmental model which is based on ideal flow units I showed that the hydrodynamic behavior of the detailed CFD model can be reproduced. With the application of the compartmental model we got a tool for the calculation of the residence time analysis with significantly less computational cost.

Related publications: 6., 10., 18.

2. To evaluate the performance of continuous mixers, I defined a multi-aspect mixing measure and used it to develop an evaluation method. The advantage of the developed method is that in contrary to the traditional simulations based on the solution of the component balance equation, only the stationary velocity field has to be used for the calculations.

- a) I developed metrics of mixing to define the mixedness. These metrics are applicable to qualify static and jet mixers.
- b) I defined the concept of local coverage, which can be used to qualify the mixer by interpreting the local coverage to the whole outlet boundary.
- c) I developed a calculation method that is suitable for determining the mixing performance of mixers based on the position data of the marked phase elements using the stationary velocity field obtained by the flow simulation.

Related publications: 1., 13.

3. Models using the immersed boundary method based on the direct numerical simulation modeling approach are developed for particle level modelling of two-phase flow including the phase interactions for different processes such as fluidization, adsorption and sedimentation.

- a) A simulator of a two-phase system, including a fluidized particle is developed in which the gas-solid interaction is calculated by the immersed boundary method. The algorithm of the calculation is usable to calculate the moving of a solid particle considering the properties of the surrounding flow field.
- b) I developed a particle level model to simulate the adsorption process on the surface of an adsorbent particle. I constructed a flow model of a two-phase system containing the adsorbent particle based on the immersed boundary method. The flow model is completed with a component balance for the component to be adsorbed and first-order kinetics describing the adsorption process. The developed method makes it possible to determine the degree of saturation of the adsorbed components on different surface elements of the particle.
- c) I also developed a particle level model based on the immersed boundary method that can calculate the sedimentation of a solid particle in Newtonian fluid. The simulator is suitable to calculate the moving of the solid particle in still fluid based on the properties of the surrounding flow field.

Related publications: 3., 7., 8., 9., 11., 12., 14., 15., 16., 17., 19., 20.

Publikációk

Folyóiratcikkek:

1. Gyurik, L., Ulbert, Zs., Molnár, B., Varga, T., Chován, T., Egedy, A., 2020, CFD Based Nozzle Design for a Multijet Mixer, **Chemical Engineering and Processing - Process Intensification** Vol. 157 /DOI: 10.1016/j.cep.2020.108121/
2. Egedy, A., Gyurik, L., Ulbert, Zs., Rado A., 2020, CFD modeling and environmental assessment of a VOC removal silo, **International Journal of Environmental Science and Technology** /DOI: 10.1007/s13762-020-02833-7
3. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., Cronin, K., Ring, D., 2019, Modelling the Motion of a Single Solid Bead in a Newtonian Fluid by Two-Phase CFD Methods, **Chemical Engineering Transactions**, Vol. 76., pp. 175-180. /DOI: 10.3303/CET1976030/
4. Egedy, A., Gyurik, L., Ulbert, Zs., Rado, A., 2019, CFD Modelling and Simulation of a VOC Removal Silo, **Chemical Engineering Transactions**, Vol. 76., pp. 163-168. /DOI: 10.3303/CET1976028/
5. Egedy, A., Gyurik, L., Varga T., Zou, J., Miskolczi, N., Yang, H., 2018, Kinetic-compartmental modelling of potassium-containing cellulose feedstock gasification, **Frontiers of Chemical Science and Engineering**, Vol. 12., pp. 708-717. /DOI: 10.1007/s11705-018-1767-y/
6. Gyurik, L., Egedy, A., Zou, J., Miskolczi, N., Ulbert, Zs., Yang, H., 2018, Hydrodynamic modelling of a two-stage biomass gasification reactor, **Journal of the Energy Institute** Vol. 92., pp. 403-412. /DOI: 10.1016/j.joei.2018.05.007/
7. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2018, Simulation of Gas-Solid Flow in Quasi-Two-Dimensional Fluidized Bed by Immersed Boundary Method, **Chemical Engineering Transactions**, Vol. 70., pp. 805-810. /DOI: 10.3303/CET1870135/

Konferencia kiadványban megjelent publikációk:

8. Gyurik, L., Egedy, A., Varga, T., Ulbert, Zs., 2020, Two-phase Flow Modelling and Simulation of Gas Purification Column, **Proceedings of the 30th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE30)** Part A, pp. 199-204. /ISBN: 978-0-12-823511-9/
9. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2018, Modeling Solid-Liquid Settling System as a Two-Phase Flow Problem, **COMSOL Conference 2018 Lausanne** 6 p
10. Gyurik, L., Egedy, A., Zou, J., Miskolczi, N., Ulbert, Zs., Yang, H., 2017, Hydrodynamic Modelling of a Gasification Reactor, **Műszaki Kémiai Napok 2017**, pp. 11-16. /ISBN: 978-963-396-094-3/

Előadások, poszterek:

11. Gyurik, L., Egedy, A., Varga, T., Ulbert, Zs., 2020, Two-phase Flow Modelling and Simulation of Gas Purification Column, **30th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE30 Virtual Symposium**, 2020. 08. 30. – 09. 02.
12. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., Cronin, K., Ring, D., 2019, Modelling the Motion of a Single Solid Bead in a Newtonian Fluid by Two-Phase CFD Methods, **22nd Conference on Process Integration for Energy Saving and Pollution Reduction - PRES'19**, Agios Nikolaos, Görögország, 2019. 10. 20-23.
13. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., Diszperzer többcélú optimalizálása numerikus áramlástan szimulációk segítségével, **Műszaki Kémiai Napok 2019**, Veszprém, 2019. 04. 16-18.
14. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2018, Modeling Solid-Liquid Settling System as a Two-Phase Flow Problem, **COMSOL Conference 2018**, Lausanne, Svájc, 2018. 10. 22-24.
15. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2018, Simulation of Gas-Solid Flow in Quasi-Two-Dimensional Fluidized Bed by Immersed Boundary Method, **21st Conference on Process Integration for Energy Saving and Pollution Reduction - PRES'18**, Prága, Csehország, 2018. 08. 25-29.
16. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2018, Immersed Boundary módszer alkalmazása gáz-szilárd kétfázisú rendszerek modellezésére és szimulációjára, **Műszaki Kémiai Napok 2018** Veszprém, 2018. 04. 24-26.
17. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2018, Immersed Boundary Method for Modelling of Multiphase Flow, **Tavaszi Szél Nemzetközi Multidisziplináris Konferencia 2018**, Győr, 2018. 05. 04-06.
18. Gyurik, L., Egedy, A., Zou, J., Miskolczi, N., Ulbert, Zs., Yang, H., 2017, Hydrodynamic Modelling of a Gasification Reactor, **Műszaki Kémiai Napok 2017**, Veszprém, 2017. 04. 25-27.
19. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2017, Modelling and Computer-aided Simulation of Gas-solid Two-phase Flows, **Tavaszi Szél Nemzetközi Multidisziplináris Konferencia 2017**, Miskolc, 2017. 03. 31. – 04. 02.
20. Gyurik, L., Egedy, A., Ulbert, Zs., 2016, Gáz-szilárd kétfázisú áramlások modellezése és számítógépes szimulációja, **XXII. Nemzetközi Vegyészkonferencia**, Temesvár, Románia, 2016. 11. 03-06.

Irodalomjegyzék

- [1] T. B. Anderson és R. Jackson, „Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds. Equations of Motion”, *Ind. Eng. Chem. Fund.*, köt. 6, sz. 4, o. 527–539, nov. 1967, doi: 10.1021/i160024a007.
- [2] S. Chapman és T. G. Cowling, *The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases*, 3rd ed. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 1990.
- [3] J. Ding és D. Gidaspow, „A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow”, *AIChE J.*, köt. 36, sz. 4, o. 523–538, ápr. 1990, doi: 10.1002/aic.690360404.
- [4] A. Boemer, H. Qi, és U. Renz, „Eulerian simulation of bubble formation at a jet in a two-dimensional fluidized bed”, *International Journal of Multiphase Flow*, köt. 23, sz. 5, o. 927–944, szept. 1997, doi: 10.1016/S0301-9322(97)00018-9.
- [5] M. Banaei, N. G. Deen, M. van Sint Annaland, és J. A. M. Kuipers, „Particle mixing rates using the two-fluid model”, *Particuology*, köt. 36, o. 13–26, febr. 2018, doi: 10.1016/j.partic.2017.01.009.
- [6] R. I. Issa és M. H. W. Kempf, „Simulation of slug flow in horizontal and nearly horizontal pipes with the two-fluid model”, *International Journal of Multiphase Flow*, köt. 29, sz. 1, o. 69–95, jan. 2003, doi: 10.1016/S0301-9322(02)00127-1.
- [7] B. Noetinger, „A two fluid model for sedimentation phenomena”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, köt. 157, sz. 3, o. 1139–1179, jún. 1989, doi: 10.1016/0378-4371(89)90037-X.
- [8] W. Zhong, A. Yu, X. Liu, Z. Tong, és H. Zhang, „DEM/CFD-DEM Modelling of Non-spherical Particulate Systems: Theoretical Developments and Applications”, *Powder Technology*, köt. 302, o. 108–152, nov. 2016, doi: 10.1016/j.powtec.2016.07.010.
- [9] Yi. He, A. E. Bayly, és A. Hassanpour, „Coupling CFD-DEM with dynamic meshing: A new approach for fluid-structure interaction in particle-fluid flows”, *Powder Technology*, köt. 325, o. 620–631, febr. 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2017.11.045.
- [10] K. Luo, F. Wu, S. Yang, és J. Fan, „CFD–DEM study of mixing and dispersion behaviors of solid phase in a bubbling fluidized bed”, *Powder Technology*, köt. 274, o. 482–493, ápr. 2015, doi: 10.1016/j.powtec.2015.01.046.
- [11] P. A. Cundall és O. D. Strack, „A discrete numerical model for granular assemblies”, *Geotechnique*, köt. 29, sz. 1, o. 47–65, 1979.
- [12] S. Deb és D. Tafti, „Investigation of flat bottomed spouted bed with multiple jets using DEM–CFD framework”, *Powder Technology*, köt. 254, o. 387–402, márc. 2014, doi: 10.1016/j.powtec.2014.01.045.
- [13] J. Horabik és M. Molenda, „Parameters and contact models for DEM simulations of agricultural granular materials: A review”, *Biosystems Engineering*, köt. 147, o. 206–225, júl. 2016, doi: 10.1016/j.biosystemseng.2016.02.017.

- [14] J. Shen, C. Wheeler, D. Ilic, és J. Chen, „Application of open source FEM and DEM simulations for dynamic belt deflection modelling”, *Powder Technology*, aug. 2019, doi: 10.1016/j.powtec.2019.08.068.
- [15] E. Gallego, J. M. Fuentes, J. Wiącek, J. R. Villar, és F. Ayuga, „DEM analysis of the flow and friction of spherical particles in steel silos with corrugated walls”, *Powder Technology*, köt. 355, o. 425–437, okt. 2019, doi: 10.1016/j.powtec.2019.07.072.
- [16] E. Yazdani és S. H. Hashemabadi, „The influence of cohesiveness on particulate bed segregation and mixing in rotating drum using DEM”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, köt. 525, o. 788–797, júl. 2019, doi: 10.1016/j.physa.2019.03.127.
- [17] H. Ma és Y. Zhao, „Modelling of the flow of ellipsoidal particles in a horizontal rotating drum based on DEM simulation”, *Chemical Engineering Science*, köt. 172, o. 636–651, nov. 2017, doi: 10.1016/j.ces.2017.07.017.
- [18] J. Gyenis, Zs. Ulbert, J. Szépvölgyi, és Y. Tsuji, „Discrete particle simulation of flow regimes in bulk solids mixing and conveying”, *Powder Technology*, köt. 104, sz. 3, o. 248–257, okt. 1999, doi: 10.1016/S0032-5910(99)00102-3.
- [19] Y. You és Y. Zhao, „Discrete element modelling of ellipsoidal particles using super-ellipsoids and multi-spheres: A comparative study”, *Powder Technology*, köt. 331, o. 179–191, máj. 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.03.017.
- [20] J. L. Steger és D. S. Chaussee, „Generation of Body-Fitted Coordinates Using Hyperbolic Partial Differential Equations”, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, köt. 1, sz. 4, o. 431–437, dec. 1980, doi: 10.1137/0901031.
- [21] A. G. Dixon, M. Nijemeisland, és E. H. Stitt, „Systematic mesh development for 3D CFD simulation of fixed beds: Contact points study”, *Computers & Chemical Engineering*, köt. 48, o. 135–153, jan. 2013, doi: 10.1016/j.compchemeng.2012.08.011.
- [22] S. Rebughini, A. Cuoci, és M. Maestri, „Handling contact points in reactive CFD simulations of heterogeneous catalytic fixed bed reactors”, *Chemical Engineering Science*, köt. 141, o. 240–249, febr. 2016, doi: 10.1016/j.ces.2015.11.013.
- [23] C. S. Peskin, „Flow patterns around heart valves: A numerical method”, *Journal of Computational Physics*, köt. 10, sz. 2, o. 252–271, okt. 1972, doi: 10.1016/0021-9991(72)90065-4.
- [24] R. Mittal és G. Iaccarino, „IMMERSED BOUNDARY METHODS”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, köt. 37, sz. 1, o. 239–261, jan. 2005, doi: 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743.
- [25] H.-J. Bungartz és M. Schäfer, Szerk., *Fluid-structure interaction: modelling, simulation, optimisation*. Berlin ; New York: Springer-Verlag, 2006.
- [26] V. A. Epanechnikov, „Non-Parametric Estimation of a Multivariate Probability Density”, *Theory of Probability & Its Applications*, köt. 14, sz. 1, o. 153–158, jan. 1969, doi: 10.1137/1114019.
- [27] R. P. Beyer és R. J. LeVeque, „Analysis of a One-Dimensional Model for the Immersed Boundary Method”, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, köt. 29, sz. 2, o. 332–364, ápr. 1992, doi: 10.1137/0729022.

- [28] J. Mohd-Yusof, „Combined immersed-boundary/B-spline methods for simulations of flow in complex geometries”, *Center for Turbulence Research*, 1997.
- [29] E. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi, és J. Mohd-Yusof, „Combined Immersed-Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulations”, *Journal of Computational Physics*, köt. 161, sz. 1, o. 35–60, jún. 2000, doi: 10.1006/jcph.2000.6484.
- [30] A. L. F. Lima E Silva, A. Silveira-Neto, és J. J. R. Damasceno, „Numerical simulation of two-dimensional flows over a circular cylinder using the immersed boundary method”, *Journal of Computational Physics*, köt. 189, sz. 2, o. 351–370, aug. 2003, doi: 10.1016/S0021-9991(03)00214-6.
- [31] M. Uhlmann, „An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows”, *Journal of Computational Physics*, köt. 209, sz. 2, o. 448–476, nov. 2005, doi: 10.1016/j.jcp.2005.03.017.
- [32] J. Karátson, R. Horváth, és F. Izsák, *Parciális differenciálegyenletek numerikus módszerei számítógépes alkalmazásokkal*. 2013.
- [33] P. W. McDonald, „The Computation of Transonic Flow Through Two-Dimensional Gas Turbine Cascades”, in *ASME 1971 International Gas Turbine Conference and Products Show*, Houston, Texas, USA, márc. 1971, o. V001T01A089, doi: 10.1115/71-GT-89.
- [34] R. Maccormack, „The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering”, ápr. 1969, doi: 10.2514/6.1969-354.
- [35] P. Lax és B. Wendroff, „Systems of conservation laws”, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, köt. 13, sz. 2, o. 217–237, máj. 1960, doi: 10.1002/cpa.3160130205.
- [36] R. Courant, K. Friedrichs, és H. Lewy, „Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik”, *Mathematische Annalen*, köt. 100, sz. 1, o. 32–74, dec. 1928, doi: 10.1007/BF01448839.
- [37] S. V. Patankar és D. B. Spalding, „A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, köt. 15, sz. 10, o. 1787–1806, okt. 1972, doi: 10.1016/0017-9310(72)90054-3.
- [38] S. V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York: Hemisphere Publ. Co, 1980.
- [39] J. P. Van Doormaal és G. D. Raithby, „ENHANCEMENTS OF THE SIMPLE METHOD FOR PREDICTING INCOMPRESSIBLE FLUID FLOWS”, *Numerical Heat Transfer*, köt. 7, sz. 2, o. 147–163, ápr. 1984, doi: 10.1080/01495728408961817.
- [40] R. I. Issa, „Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting”, *Journal of Computational Physics*, köt. 62, sz. 1, o. 40–65, jan. 1986, doi: 10.1016/0021-9991(86)90099-9.
- [41] C. J. Greenshields, *User Guide version 7*. OpenFOAM Foundation Ltd., 2019.
- [42] L. Thomas, „Elliptic problems in linear difference equations over a network”. Watson Science Computer Laboratory Report, Columbia University, NY, 1949.
- [43] S. Osher és J. A. Sethian, „Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations”, *Journal of*

- Computational Physics*, köt. 79, sz. 1, o. 12–49, nov. 1988, doi: 10.1016/0021-9991(88)90002-2.
- [44] A. Foley, „CFD Applied to Two-Phase Flow, an Italian Dressing Simulation”. 2013, [Online]. Elérhető: <https://www.comsol.com/blogs/cfd-applied-to-two-phase-flow-an-italian-dressing-simulation/>.
- [45] „Rising Bubble”. [Online]. Elérhető: <https://www.comsol.com/model/rising-bubble-177>.
- [46] N. Shervani-Tabar és O. V. Vasilyev, „Stabilized conservative level set method”, *Journal of Computational Physics*, köt. 375, o. 1033–1044, dec. 2018, doi: 10.1016/j.jcp.2018.09.020.
- [47] „The Level Set Method”, <https://www.comsol.com/forum/thread/attachment/37361/The-level-set-methodfrom-MEMS-Module-5198.pdf>, o. 203–211.
- [48] Lajos T., „Az áramlástan alapjai”, o. 195, 1992.
- [49] Y. V. Polezhaev és I. V. Chircov, *A-to-Z Guide to Thermodynamics, Heat and Mass Transfer, and Fluids Engineering: AtoZ*, köt. D. Begellhouse, 2006.
- [50] B. E. Launder és D. B. Spalding, „The numerical computation of turbulent flows”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, köt. 3, sz. 2, o. 269–289, márc. 1974, doi: 10.1016/0045-7825(74)90029-2.
- [51] P. V. Danckwerts, „Continuous flow systems: distribution of residence times”, *Chemical engineering science*, köt. 2, sz. 1, o. 1–13, 1953.
- [52] I. L. Gamba, S. Marquez Damian, D. A. Estenoz, N. Nigro, M. A. Storti, és D. Knoepfel, „Residence Time Distribution Determination of a Continuous Stirred Tank Reactor using Computational Fluid Dynamics and its Application on the Mathematical Modeling of Styrene Polymerization”, *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, köt. 10, sz. 1, jan. 2012, doi: 10.1515/1542-6580.3057.
- [53] J. T. Adeosun és A. Lawal, „Numerical and experimental studies of mixing characteristics in a T-junction microchannel using residence-time distribution”, *Chemical Engineering Science*, köt. 64, sz. 10, o. 2422–2432, máj. 2009, doi: 10.1016/j.ces.2009.02.013.
- [54] O. Levenspiel, *Chemical reaction engineering*, 3rd ed. New York: Wiley, 1999.
- [55] L. Gyurik, A. Egedy, J. Zou, N. Miskolczi, Z. Ulbert, és H. Yang, „Hydrodynamic modelling of a two-stage biomass gasification reactor”, *Journal of the Energy Institute*, jún. 2018, doi: 10.1016/j.joei.2018.05.007.
- [56] S. S. Alves, J. M. T. Vasconcelos, és J. Barata, „Alternative compartment models of mixing in tall tanks agitated by multi-Rushton turbines”, *Chemical Engineering Research and Design*, köt. 75, sz. 3, o. 334–338, 1997.
- [57] P. Arora, A. F. A. Hoadley, S. M. Mahajani, és A. Ganesh, „Compartment model for a dual fluidized bed biomass gasifier”, *Chemical Engineering Research and Design*, köt. 117, o. 274–286, jan. 2017, doi: 10.1016/j.cherd.2016.10.025.
- [58] X. Kong, W. Zhong, W. Du, és F. Qian, „Compartment modeling of coal gasification in an entrained flow gasifier: A study on the influence of operating conditions”, *Energy Conversion and Management*, köt. 82, o. 202–211, jún. 2014, doi: 10.1016/j.enconman.2014.01.055.

- [59] G. A. Sod, „A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws”, *Journal of computational physics*, köt. 27, sz. 1, o. 1–31, 1978.
- [60] S. Godunov, „A Difference Scheme for Numerical Solution of Discontinuous Solution of Hydrodynamic Equations”, *Matematicheskii Sbornik*, köt. 89, sz. 3, o. 271–306, 1959.
- [61] A. Harten, „High resolution schemes for hyperbolic conservation laws”, *Journal of Computational Physics*, köt. 49, sz. 3, o. 357–393, márc. 1983, doi: 10.1016/0021-9991(83)90136-5.
- [62] P. D. Lax, *Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1973.
- [63] K. W. Thompson, „Time-dependent boundary conditions for hyperbolic systems, II”, *Journal of Computational Physics*, köt. 89, sz. 2, o. 439–461, aug. 1990, doi: 10.1016/0021-9991(90)90152-Q.
- [64] A. Egedy, „Diszperzerek vizsgálata korszerű folyamatmérnöki technikák alkalmazásával”. Szakdolgozat, Pannon Egyetem, 2014.
- [65] Z. Liu, A. Quek, és R. Balasubramanian, „Preparation and characterization of fuel pellets from woody biomass, agro-residues and their corresponding hydrochars”, *Applied Energy*, köt. 113, o. 1315–1322, jan. 2014, doi: 10.1016/j.apenergy.2013.08.087.
- [66] A. Anca-Couce, „Reaction mechanisms and multi-scale modelling of lignocellulosic biomass pyrolysis”, *Progress in Energy and Combustion Science*, köt. 53, o. 41–79, márc. 2016, doi: 10.1016/j.pecs.2015.10.002.
- [67] K. Matsumoto, K. Takeno, T. Ichinose, T. Ogi, és M. Nakanishi, „Gasification reaction kinetics on biomass char obtained as a by-product of gasification in an entrained-flow gasifier with steam and oxygen at 900–1000°C”, *Fuel*, köt. 88, sz. 3, o. 519–527, márc. 2009, doi: 10.1016/j.fuel.2008.09.022.
- [68] I. Ahmed és A. K. Gupta, „Syngas yield during pyrolysis and steam gasification of paper”, *Applied Energy*, köt. 86, sz. 9, o. 1813–1821, szept. 2009, doi: 10.1016/j.apenergy.2009.01.025.
- [69] Y. Wang, K. Yoshikawa, T. Namioka, és Y. Hashimoto, „Performance optimization of two-staged gasification system for woody biomass”, *Fuel Processing Technology*, köt. 88, sz. 3, o. 243–250, márc. 2007, doi: 10.1016/j.fuproc.2006.10.002.
- [70] S. K. Sansaniwal, K. Pal, M. A. Rosen, és S. K. Tyagi, „Recent advances in the development of biomass gasification technology: A comprehensive review”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, köt. 72, o. 363–384, máj. 2017, doi: 10.1016/j.rser.2017.01.038.
- [71] A. Gómez-Barea és B. Leckner, „Modeling of biomass gasification in fluidized bed”, *Progress in Energy and Combustion Science*, köt. 36, sz. 4, o. 444–509, aug. 2010, doi: 10.1016/j.pecs.2009.12.002.
- [72] A. Sharma, V. Pareek, és D. Zhang, „Biomass pyrolysis—A review of modelling, process parameters and catalytic studies”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, köt. 50, o. 1081–1096, okt. 2015, doi: 10.1016/j.rser.2015.04.193.

-
- [73] J. Zou, H. Yang, Z. Zeng, C. Wu, P. T. Williams, és H. Chen, „Hydrogen production from pyrolysis catalytic reforming of cellulose in the presence of K alkali metal”, *International Journal of Hydrogen Energy*, köt. 41, sz. 25, o. 10598–10607, júl. 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.04.207.
- [74] B. Birge, „PSOt-a particle swarm optimization toolbox for use with Matlab”, in *Swarm Intelligence Symposium, 2003. SIS'03. Proceedings of the 2003 IEEE*, 2003, o. 182–186, Elérés: jún. 22, 2017. [Online]. Elérhető: <http://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/1202265/>.
- [75] M. Bauer és G. Eigenberger, „Multiscale modeling of hydrodynamics, mass transfer and reaction in bubble column reactors”, *Chemical Engineering Science*, köt. 56, sz. 3, o. 1067–1074, febr. 2001, doi: 10.1016/S0009-2509(00)00323-7.
- [76] F. M. Dautzenberg és M. Mukherjee, „Process intensification using multifunctional reactors”, *Chemical Engineering Science*, köt. 56, sz. 2, o. 251–267, jan. 2001, doi: 10.1016/S0009-2509(00)00228-1.
- [77] J. Jiang, H. Wu, L. Ni, és M. Zou, „CFD simulation to study batch reactor thermal runaway behavior based on esterification reaction”, *Process Safety and Environmental Protection*, köt. 120, o. 87–96, nov. 2018, doi: 10.1016/j.psep.2018.08.029.
- [78] M. Rahimi és A. Parvareh, „CFD study on mixing by coupled jet-impeller mixers in a large crude oil storage tank”, *Computers & Chemical Engineering*, köt. 31, sz. 7, o. 737–744, júl. 2007, doi: 10.1016/j.compchemeng.2006.07.009.
- [79] P. Vite-Martínez, C. Durán-Valencia, J. A. Cruz-Maya, A. Ramírez-López, és S. López-Ramírez, „Optimization of reagents injection in a stirred batch reactor by numerical simulation”, *Computers & Chemical Engineering*, köt. 60, o. 307–314, jan. 2014, doi: 10.1016/j.compchemeng.2013.09.005.
- [80] F. Xue, F. Luo, H. Cui, A. Moro, és L. Zhou, „Numerical analyses of transient flow characteristics within each nozzle hole of an asymmetric diesel injector”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, köt. 104, o. 18–27, jan. 2017, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.08.027.
- [81] D. Nguyen és mtsai., „Spray flow structure from twin-hole diesel injector nozzles”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, köt. 86, o. 235–247, szept. 2017, doi: 10.1016/j.expthermflusci.2017.04.020.
- [82] T. Zhang, B. Dong, X. Chen, Z. Qiu, R. Jiang, és W. Li, „Spray characteristics of pressure-swirl nozzles at different nozzle diameters”, *Applied Thermal Engineering*, köt. 121, o. 984–991, júl. 2017, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2017.04.089.
- [83] J.-P. Torr  , D. F. Fletcher, T. Lasuye, és C. Xuereb, „An experimental and CFD study of liquid jet injection into a partially baffled mixing vessel: A contribution to process safety by improving the quenching of runaway reactions”, *Chemical Engineering Science*, köt. 63, sz. 4, o. 924–942, febr. 2008, doi: 10.1016/j.ces.2007.10.031.
- [84] A. M. Sultan, C. P. Fonte, M. M. Dias, J. C. B. Lopes, és R. J. Santos, „Experimental study of flow regime and mixing in T-jets mixers”, *Chemical Engineering Science*, köt. 73, o. 388–399, m  j. 2012, doi: 10.1016/j.ces.2012.02.010.

- [85] M. Zhou, D. Bai, Y. Zong, L. Zhao, és J. N. Thornock, „Numerical investigation of turbulent reactive mixing in a novel coaxial jet static mixer”, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, köt. 122, o. 190–203, dec. 2017, doi: 10.1016/j.cep.2017.09.017.
- [86] M. P. Vasilev és R. Sh. Abiev, „Turbulent droplets dispersion in a pulsating flow type apparatus – New type of static disperser”, *Chemical Engineering Journal*, köt. 349, o. 646–661, okt. 2018, doi: 10.1016/j.cej.2018.05.104.
- [87] K. Wang, C. Bai, Y. Wang, és M. Liu, „Flow dead zone analysis and structure optimization for the trefoil-baffle heat exchanger”, *International Journal of Thermal Sciences*, köt. 140, o. 127–134, jún. 2019, doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2019.02.044.
- [88] A. W. Patwardhan, „CFD modeling of jet mixed tanks”, *Chemical Engineering Science*, köt. 57, sz. 8, o. 1307–1318, ápr. 2002, doi: 10.1016/S0009-2509(02)00049-0.
- [89] J. M. Gillian és D. J. Kirwan, „Identification and correlation of mixing times in opposed-jet mixers”, *Chemical Engineering Communications*, köt. 195, sz. 12, o. 1553–1574, aug. 2008, doi: 10.1080/00986440802115614.
- [90] K. Krupa, M. I. Nunes, R. J. Santos, és J. R. Bourne, „Characterization of micromixing in T-jet mixers”, *Chemical Engineering Science*, köt. 111, o. 48–55, máj. 2014, doi: 10.1016/j.ces.2014.02.018.
- [91] M. Rahimi és A. Parvareh, „Experimental and CFD investigation on mixing by a jet in a semi-industrial stirred tank”, *Chemical Engineering Journal*, köt. 115, sz. 1–2, o. 85–92, dec. 2005, doi: 10.1016/j.cej.2005.09.021.
- [92] A. Egedy, T. Varga, és T. Chovan, „Particle tracing based validation for CFD models of stirred reactors”, *Chemical Engineering Transactions*, o. 1429–1434, máj. 2013, doi: 10.3303/CET1332239.
- [93] M. Pasha, A. Hassanpour, H. Ahmadian, H. S. Tan, A. Bayly, és M. Ghadiri, „A comparative analysis of particle tracking in a mixer by discrete element method and positron emission particle tracking”, *Powder Technology*, köt. 270, o. 569–574, jan. 2015, doi: 10.1016/j.powtec.2014.09.007.
- [94] W. Huang, S. Moon, Y. Gao, J. Wang, D. Ozawa, és A. Matsumoto, „Hole number effect on spray dynamics of multi-hole diesel nozzles: An observation from three- to nine-hole nozzles”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, köt. 102, o. 387–396, ápr. 2019, doi: 10.1016/j.expthermflusci.2018.12.022.
- [95] V. C. Patkar és A. W. Patwardhan, „Effect of jet angle and orifice shape in gas–gas mixer using CFD”, *Chemical Engineering Research and Design*, köt. 89, sz. 7, o. 904–920, júl. 2011, doi: 10.1016/j.cherd.2010.10.023.
- [96] D. J. Thomson, „Random walk models of turbulent dispersion”, *Department of Mathematics and Statistics, Brunel University*, köt. A Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy, 1988.
- [97] Z. Fonyó és G. Fábry, *Vegyipari művelettani alapismeretek*. Nemzeti Tankönyvkiadó.
- [98] Y. M. John, R. Patel, és I. M. Mujtaba, „Modelling and simulation of an industrial riser in fluid catalytic cracking process”, *Computers & Chemical Engineering*, köt. 106, o. 730–743, nov. 2017, doi: 10.1016/j.compchemeng.2017.01.013.

- [99] A. Afshar Ebrahimi és S. Foroutan Ghazvini, „Experimental attrition study of FCC catalysts through 2D/3D contour plots and response surface models”, *Powder Technology*, köt. 336, o. 80–84, aug. 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.05.046.
- [100] J. M. Weber, R. C. Stehle, R. W. Breault, és J. De Wilde, „Experimental study of the application of rotating fluidized beds to particle separation”, *Powder Technology*, köt. 316, o. 123–130, júl. 2017, doi: 10.1016/j.powtec.2016.12.076.
- [101] V. V. Idakiev, S. Marx, A. Roßau, A. Bück, E. Tsotsas, és L. Mörl, „Inductive heating of fluidized beds: Influence on fluidization behavior”, *Powder Technology*, köt. 286, o. 90–97, dec. 2015, doi: 10.1016/j.powtec.2015.08.003.
- [102] V. V. Idakiev, P. V. Lazarova, A. Bück, E. Tsotsas, és L. Mörl, „Inductive heating of fluidized beds: Drying of particulate solids”, *Powder Technology*, köt. 306, o. 26–33, jan. 2017, doi: 10.1016/j.powtec.2016.11.011.
- [103] V. V. Idakiev, C. Steinke, F. Sondej, A. Bück, E. Tsotsas, és L. Mörl, „Inductive heating of fluidized beds: Spray coating process”, *Powder Technology*, köt. 328, o. 26–37, ápr. 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.01.017.
- [104] S. Kumagai, J. Lu, Y. Fukushima, H. Ohno, T. Kameda, és T. Yoshioka, „Diagnosing chlorine industrial metabolism by evaluating the potential of chlorine recovery from polyvinyl chloride wastes—A case study in Japan”, *Resources, Conservation and Recycling*, köt. 133, o. 354–361, jún. 2018, doi: 10.1016/j.resconrec.2017.07.007.
- [105] A. Veksha, A. Giannis, W. Oh, V. Chang, és G. Lisak, „Upgrading of non-condensable pyrolysis gas from mixed plastics through catalytic decomposition and dechlorination”, *Fuel Processing Technology*, köt. 170, o. 13–20, febr. 2018, doi: 10.1016/j.fuproc.2017.10.019.
- [106] „<https://en.wikipedia.org/wiki/Adsorption>”. dec. 09, 2019, [Online]. Elérhető: <https://en.wikipedia.org/wiki/Adsorption>.
- [107] R. B. Bird, W. E. Stewart, és E. N. Lightfoot, *Transport phenomena*, 2nd, Wiley international ed kiad. New York: J. Wiley, 2002.
- [108] H. C. Yee, „A class of high resolution explicit and implicit shock-capturing methods”. NASA TM 101088, 1989.
- [109] P. Van Santen, P. G. E. F. Augustinus, B. M. Janssen-Stelder, S. Quartel, és N. H. Tri, „Sedimentation in an estuarine mangrove system”, *Journal of Asian Earth Sciences*, köt. 29, sz. 4, o. 566–575, febr. 2007, doi: 10.1016/j.jseaes.2006.05.011.
- [110] M. Ochowiak, M. Matuszak, S. Włodarczak, M. Ancukiewicz, és A. Krupińska, „The modified swirl sedimentation tanks for water purification”, *Journal of Environmental Management*, köt. 189, o. 22–28, márc. 2017, doi: 10.1016/j.jenvman.2016.12.023.
- [111] V. Gaur, J. Schalk, és S. G. Anema, „Sedimentation in UHT milk”, *International Dairy Journal*, köt. 78, o. 92–102, márc. 2018, doi: 10.1016/j.idairyj.2017.11.003.
- [112] I. Pereira, A. Zielińska, N. R. Ferreira, A. M. Silva, és E. B. Souto, „Optimization of linalool-loaded solid lipid nanoparticles using experimental factorial design and long-term stability studies with a new centrifugal

- sedimentation method”, *International Journal of Pharmaceutics*, köt. 549, sz. 1–2, o. 261–270, okt. 2018, doi: 10.1016/j.ijpharm.2018.07.068.
- [113] I. A. Bakhteeva és mtsai., „Magnetic sedimentation of nonmagnetic TiO₂ nanoparticles in water by heteroaggregation with Fe-based nanoparticles”, *Separation and Purification Technology*, köt. 218, o. 156–163, júl. 2019, doi: 10.1016/j.seppur.2019.02.043.
- [114] Y. Li, L. Lin, és X. Li, „Chemically enhanced primary sedimentation and acidogenesis of organics in sludge for enhanced nitrogen removal in wastewater treatment”, *Journal of Cleaner Production*, köt. 244, o. 118705, jan. 2020, doi: 10.1016/j.jclepro.2019.118705.
- [115] A. Videla, D. Faúndez, J. Meneses, L. Gaete, és Y. Vargas, „Enhancement of the sedimentation rate of copper tailings by application of acoustic fields”, *Minerals Engineering*, köt. 146, o. 106096, jan. 2020, doi: 10.1016/j.mineng.2019.106096.
- [116] L. Gyurik, A. Egedy, Z. Ulbert, K. Cronin, és D. Ring, „Modelling the Motion of a Single Solid Bead in a Newtonian Fluid by Two-Phase CFD Methods”, *Chemical Engineering Transactions*, köt. 76, o. 175–180, 0 2019, doi: 10.3303/CET1976030.
- [117] R. G. Patel, O. Desjardins, B. Kong, J. Capecelatro, és R. O. Fox, „Verification of Eulerian-Eulerian and Eulerian-Lagrangian simulations for turbulent fluid-particle flows”, *AIChE Journal*, köt. 63, sz. 12, o. 5396–5412, dec. 2017, doi: 10.1002/aic.15949.
- [118] T. Jurena, M. Dohnal, és J. Hajek, „Simulation of multiphase flow in stirred tank of nonstandard design”, *Chemical Engineering Transactions*, o. 625–630, okt. 2017, doi: 10.3303/CET1761102.
- [119] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang, és A. B. Yu, „Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments”, *Chemical Engineering Science*, köt. 62, sz. 13, o. 3378–3396, júl. 2007, doi: 10.1016/j.ces.2006.12.089.
- [120] H. H. Hu, N. A. Patankar, és M. Y. Zhu, „Direct Numerical Simulations of Fluid–Solid Systems Using the Arbitrary Lagrangian–Eulerian Technique”, *Journal of Computational Physics*, köt. 169, sz. 2, o. 427–462, máj. 2001, doi: 10.1006/jcph.2000.6592.
- [121] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, és S. Osher, „An improved level set method for incompressible two-phase flows”, *Computers & Fluids*, köt. 27, sz. 5–6, o. 663–680, jún. 1998, doi: 10.1016/S0045-7930(97)00053-4.
- [122] S. Le Digabel, „Algorithm 909: NOMAD: Nonlinear Optimization with the MADS Algorithm”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, köt. 37, sz. 4, o. 1–15, febr. 2011, doi: 10.1145/1916461.1916468.