

Doktori (PhD) értekezés tézisei

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

Gyurik Livia Réka

Pannon Egyetem
Vegyészmérnöki és Anyagtudományok
Doktori Iskola

Témavezetők:

Dr. Egedy Attila egyetemi docens

Dr. Ulbert Zsolt egyetemi docens



Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék
Veszprém
2020

Előzmények és célkitűzés

A fluidum-szilárd kétfázisú áramlások számos vegyipari folyamatban előfordulnak, pl. fluidizáció, pneumatikus szállítás, szárítás vagy katalitikus krakkolás esetén. Az ilyen jellegű folyamatok mélyebb megértését segítheti a modellezés és szimuláció. A részletes szimulációs vizsgálatokon keresztüli jobb megértés számos területen hozhat gazdasági, és közvetve vagy közvetlenül környezetvédelmi hasznot. A korunkra jellemző ugrásszerű számítástechnikai fejlődés lehetővé teszi, hogy belátható időn belül eredményt kapjunk a részletes, fázis szintű modellek megoldására, mivel numerikus megoldásokra hatékony módszerek, a számítási műveletek elvégzéséhez pedig nagy teljesítményű számítógépek állnak rendelkezésre.

A doktori munkám során vegyipari jelentőségű egyfázisú és fluidum-szilárd kétfázisú rendszerek vizsgálatát céloztam meg a numerikus áramlástan (Computational Fluid Dynamics, CFD) módszereit alkalmazva a modellfejlesztésben és a szimulációs vizsgálatokban. Egyes esetekben olyan kereskedelmi programcsomagot használtam, ahol ki lehet választani az adott áramlástani modellt és a probléma megoldására legalkalmasabb numerikus módszert, más esetekben a modellegyenletek numerikus megoldását saját fejlesztésű programmal oldottam meg.

Tartózkodási idő eloszlás analízis, szemcsekövetési vizsgálat és cellás modellezés is szerepel az általam alkalmazott módszerek közt, leggyakrabban azonban a részletes, részecske szintű leírást lehetővé tevő, direkt numerikus szimulációs modellezési megközelítési módszerek közé tartozó immersed boundary módszert használtam. Eredményeimet öt esettanulmány kapcsán mutattam be, melyek a következőek: biomassza elgázosító reaktor hidrodinamikai vizsgálata tartózkodási idő eloszlás analízissel, többfuratos jetkeverő keverési teljesítményének

értékelése szemcsekövetéses vizsgálatok adatait felhasználva, fluidizált szemcse mozgásának modellezése és szimulációja, adszorberszemcse telítődésének részecske szintű modellezése és szimulációja, valamint szilárd szemcse newtoni folyadékban történő ülepedésének részecske szintű modellezése és szimulációja.

Új tudományos eredmények (tézisek)

1. Numerikus áramlástan 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 kevertégi 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 áramlástani 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 adszorpció folyamat szimulációjára. Az adszorbens részecskét és a megkötendő komponensre tartalmazó kétfázisú rendszer áramlási modelljét készítettem el az immersed boundary módszeren alapulva. Az áramlási 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.

Az eredmények gyakorlati hasznosítása

A dolgozat keretén belül kidolgozott módszerek és szimulátorok alkalmasak egyfázisú és fluidum-szilárd kétfázisú rendszerek modell-alapú vizsgálatára, a rendszerben lejátszódó részletes folyamatok megismerésére. A fizikai méréseket lehetővé tevő kísérleti berendezések létrehozása nagy jelentőséggel bír, ugyanis a modell validálás a modell fejlesztés elengedhetetlen része.

A biomasza elgázosító reaktor esettanulmányában kidolgozott modellek és az ismertetett módszerek alkalmasak a bemutatott berendezés, és más több-bemenetű rendszer hidrodinamikai vizsgálatára.

A többfuratos jetkeverő esetében a kidolgozott keveredési metrikák lehetővé teszik folyamatos működésű keverő berendezések keverési teljesítményének minősítését.

A részecske szintű gáz-szilárd vagy folyadék-szilárd kétfázisú áramlásokat leíró modellek nagy előnye, hogy részletes információt nyerhetünk a szilárd fázishoz tartozó részecskék mozgásáról és más releváns tulajdonságairól. A részecske szintű tulajdonságok megismerése elengedhetetlen a teljes részecske populáció viselkedésének megismeréséhez, amely a teljes berendezés modellezésének alapja. A részecske szintű jellemzők ismerete hozzájárulhat az ilyen rendszerekben lezajló összetett folyamatok részletesebb megismeréséhez és ezáltal a rendszerek gazdaságosabb működtetéséhez.

A szerző tudományos közleményei

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/ **Q1, IF: 3,731**
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 **Q2, IF: 2,540**
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/ **Q3, IF: -**
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/ **Q3, IF: -**
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/ **Q1, IF: 3,552**
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/ **Q1, IF: 4,748**

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/ **Q3, IF: -**

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 áramlástani 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.