

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΠΡΟΤΥΠΟΥ μ -ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ**A.A. Μουζά^{1*}, A.Γ. Κανάρης², Σ.Β. Παράς¹**

Εργαστήριο Τεχνολογίας Χημικών Εγκαταστάσεων

¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Τ.Θ. 455, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα²Xaar plc, Cambridge, UK

*mouza@auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

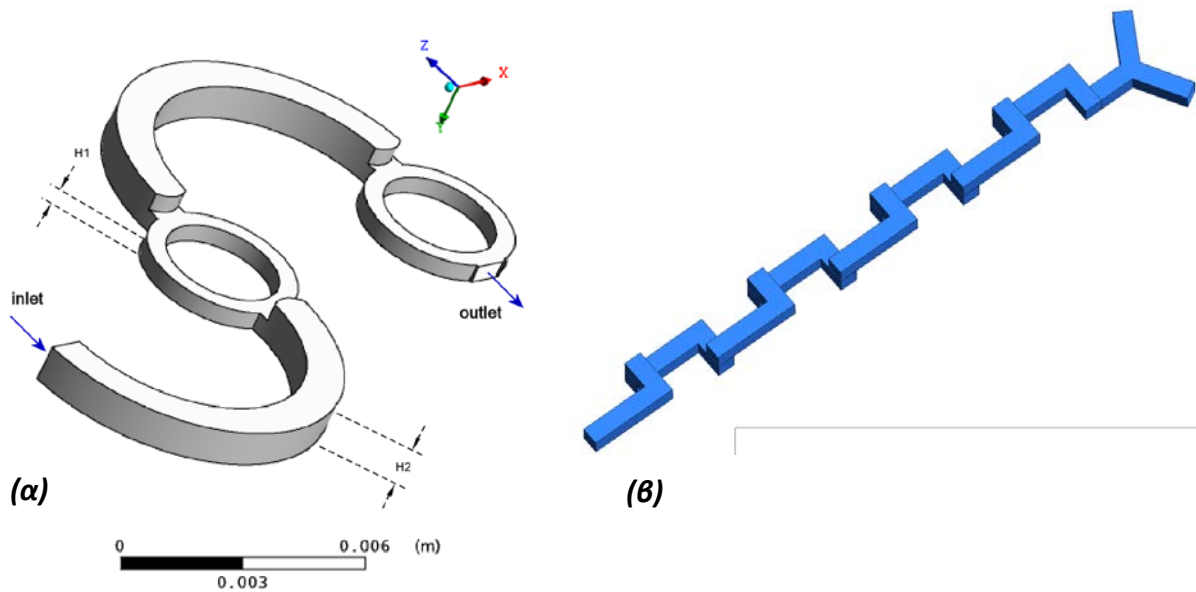
Στην εργασία διερευνάται με χρήση Κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (CFD) η αποτελεσματικότητα ενός νέου τύπου μ -αντιδραστήρα, ο οποίος περιέχει ελικοειδή διάταξη που **ενισχύει** την ανάμιξη των συστατικών μέσω της δημιουργίας στροβιλώδους ροής. Μελετάται η επίδραση των γεωμετρικών παραμέτρων του αναμίκτη (**βήμα** και **μήκος** των πτερυγίων της έλικας) και του αριθμού Re αφενός στην ποιότητα της ανάμιξης και αφετέρου στη δημιουργούμενη πτώση πίεσης. Τα αρχικά αποτελέσματα δείχνουν ικανοποιητική βελτίωση της ανάμιξης. Απώτερος στόχος είναι η κατασκευή (με *3D printing*) της πλέον αποδοτικής διάταξής και η πειραματική της μελέτη.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η συνεχώς αυξανόμενη απαίτηση της κοινωνίας για οικονομικότερες και συγχρόνως φιλικότερες προς το περιβάλλον μεθόδους παραγωγής οδήγησε στη μελέτη νέων συσκευών διεργασιών και εφαρμογή νέων μεθόδων στις υπάρχουσες. Η μικρο-Χημική Μηχανική είναι μια πολλά υποσχόμενη εναλλακτική λύση έναντι της Χημικής Μηχανικής στη μακροκλίμακα, καθώς παρουσιάζει μεγάλη δυναμική στο πεδίο της εντατικοποίησης των διεργασιών. Με τον όρο μικρο-συσκευές (**μ -συσκευές**) αναφερόμαστε σε συσκευές, των οποίων μια τουλάχιστον χαρακτηριστική διάσταση είναι της τάξης των λίγων χιλιοστών^[1]. Βασικά πλεονεκτήματα των μ -συσκευών, τα οποία οφείλονται κυρίως στον υψηλό λόγο επιφάνειας επαφής ανά μονάδα όγκου, είναι η ανάπτυξη περιβαλλοντικά φιλικών διεργασιών που παρέχουν υψηλή παραγωγική και οικονομική αποδοτικότητα και συγχρόνως προσφέρουν μεγαλύτερη ασφάλεια.

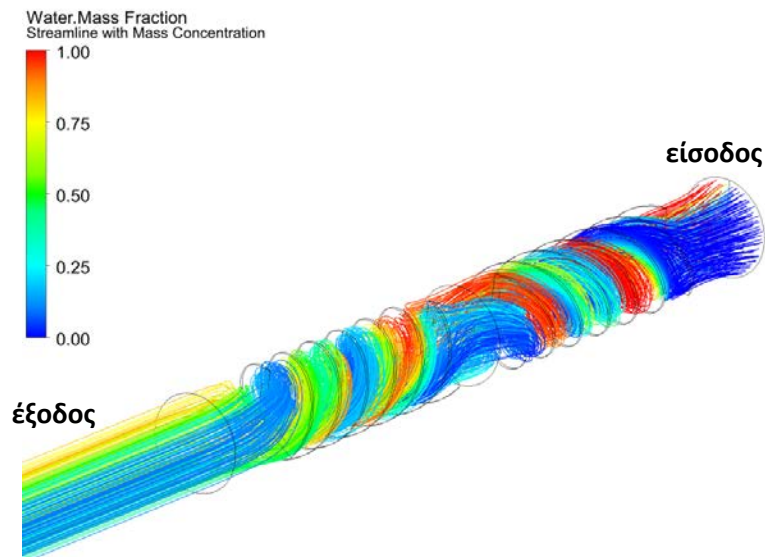
Ως γνωστόν στους αντιδραστήρες βασική προϋπόθεση είναι η καλή ανάμιξη των αντιδρώντων. Επομένως το πρόβλημα του σχεδιασμού μ -αντιδραστήρων ανάγεται πρωταρχικά σε πρόβλημα σχεδιασμού μ -αναμικτών. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο η ανάμιξη στις μικροσυσκευές μελετάται εκτενώς τα τελευταία χρόνια. Εξαιτίας των πολύ μικρών διαστάσεών τους, οι μ -αναμίκτες χαρακτηρίζονται από ροή με απουσία τύρβης, οπότε η ανάμιξη γίνεται κυρίως με μοριακά μέσα. Με βάση τον τρόπο με τον οποίο ενισχύεται η ανάμιξη οι μ -αναμικτές διακρίνονται σε παθητικούς και ενεργητικούς. Στους ενεργητικούς μ -αναμικτές χρησιμοποιείται μια εξωτερική πηγή ενέργειας. Στους παθητικούς μ -αναμικτές, με τους οποίους ασχολείται και η παρούσα εργασία, χρησιμοποιούνται κατάλληλες διαμορφώσεις της γεωμετρίας. Στην περίπτωση αυτή η ενίσχυση της ανάμιξης επιτυγχάνεται με τη δημιουργία δευτερεύουσας ροής, η οποία οφείλεται στην ύπαρξη είτε καμπύλων τμημάτων, είτε βαθμίδων ανάβασης/κατάβασης. Βασικό πλεονέκτημα των παθητικών μ -αναμικτών είναι το χαμηλό κόστος κατασκευής και ο απλός τρόπος λειτουργίας. Σε προηγούμενες εργασίες στο Εργαστήριο ΤΧΕ μελετήθηκε τόσο πειραματικά όσο και υπολογιστικά η ποιότητα της ανάμιξης για διάφορους τύπους παθητικών μ -αναμικτών^[2,3,4]. Στο **Σχήμα 1** παρουσιάζονται δύο τύποι παθητικών μ -αναμικτών (*Dean-type* ^[2,3] και *L-type* ^[4]) τα λειτουργικά χαρακτηριστικά των οποίων μελετήθηκαν σε προηγούμενες εργασίες. Η συμβολή στην ανάμιξη διατάξεων που προκαλούν στροβιλώδη ροή είναι γνωστή από τη μακροκλίμακα. Έτσι κίνητρο της μελέτης αποτέλεσε η

χρησιμοποίηση μιας διάταξης δημιουργίας στροβιλώδους ροής για την ενίσχυση της ανάμιξης στη μικρο-κλίμακα.



Σχήμα 1. Τυπικοί παθητικοί μ-αναμίκτης: α) Dean-type^[2,3] & β) L-type^[4].

Τελικός στόχος της μελέτης, το πρώτο στάδιο της οποίας παρουσιάζεται σ' αυτή την εργασία, είναι να διερευνηθεί η δυνατότητα χρήσης μιας ελικοειδούς διάταξης για τη δημιουργία στροβιλώδους ροής (**Σχήμα 2**) και την ενίσχυση της αποτελεσματικότητας της ανάμιξης. Έτσι στην παρούσα εργασία μελετάται με κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (*CFD*) η επίδραση των γεωμετρικών παραμέτρων του αναμίκτη (**βήμα** και **μήκος** των πτερυγίων της ελικοειδούς διάταξης) και του αριθμού *Reynolds* αφενός στην ποιότητα της ανάμιξης και αφετέρου στη αναπτυσσόμενη πτώση πίεσης.

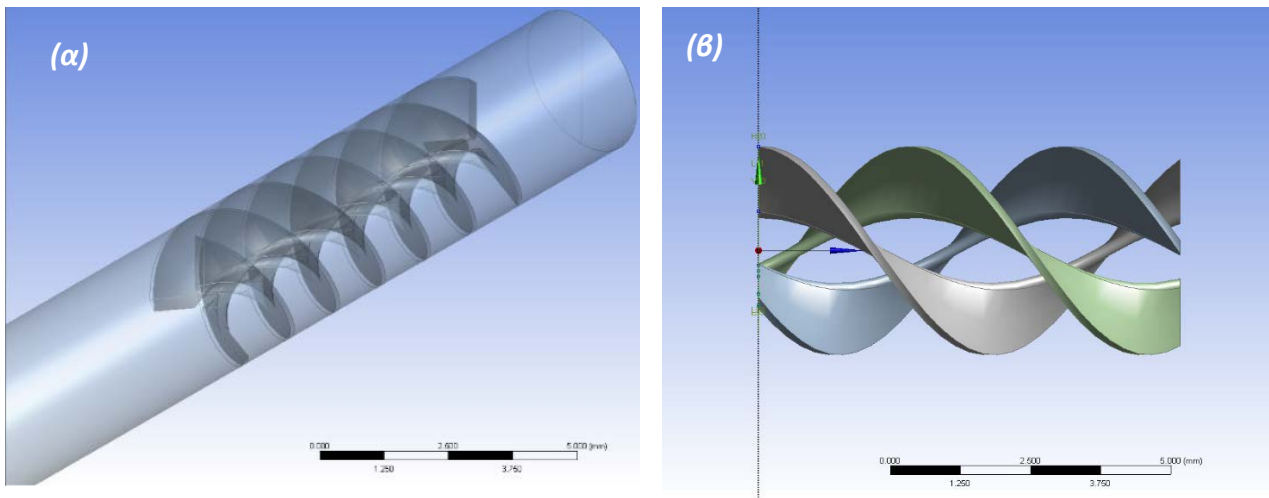


Σχήμα 2. Τυπική στροβιλώδης ροή μέσω της διάταξης.

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας *ANSYS-CFX*, ο οποίος περιλαμβάνει τα συνήθη τμήματα ενός τυπικού κώδικα *CFD*. Με τη βοήθεια του τμήματος *Geometry*, κατά την προ-επεξερ-

γασία σχεδιάστηκε ο χώρος ροής του ρευστού και κατασκευάστηκε το πλέγμα (*grid*). Κατασκευάστηκαν δυο μοντέλα, ένα με τη συσκευή στροβιλώδους ροής (**Σχήμα 3α***Error! Reference source not found.*) και ένα χωρίς την συσκευή για αναφορά. Μια τυπική συσκευή παραγωγής στροβιλώδους ροής φαίνεται στο *Error! Reference source not found.*, ενώ τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της συσκευής παρουσιάζονται στον **Πίνακα 1**.



Σχήμα 3. Σχηματική παράσταση α) του μ-αναμίκτη και β) της διάταξης δημιουργίας στροβιλώδους ροής.

Πίνακας 1. Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της συσκευής.

Μέγεθος	Τιμή
Μήκος αγωγού, L	36 mm
Διάμετρος αγωγού, D	3 mm
Απόσταση συσκευής από είσοδο του αγωγού, e	3 mm
Μήκος συσκευής, l	7.5 mm
Αριθμός πτερυγίων, N	3
Πλάτος πτερυγίων, p	0.5 mm
Γωνία μεταξύ πτερυγίων, φ	120°
Μήκος πτερυγίων, b	0.625 mm
Βήμα έλικας, c	5 mm

Χρησιμοποιώντας το τμήμα *Mesh* του *CFX* έγινε επιλογή της κατάλληλης δομής και πυκνότητας του πλέγματος. Αυτό έγινε κατασκευάζοντας, για την ίδια γεωμετρία, πλέγματα διαφορετικού πλήθους και μεγέθους κελιών στα οποία εκτελέστηκε προσομοίωση για τις ίδιες οριακές συνθήκες και επιλέχθηκε το πλέγμα εκείνο το οποίο εμφανίζει διαφορά στα αποτελέσματά του σε σχέση με το αμέσως “πυκνότερο” μικρότερη από 10%, και το οποίο τελικά αποτελείται από **2.2 εκατομμύρια** κελιά (**Σχήμα 4**).

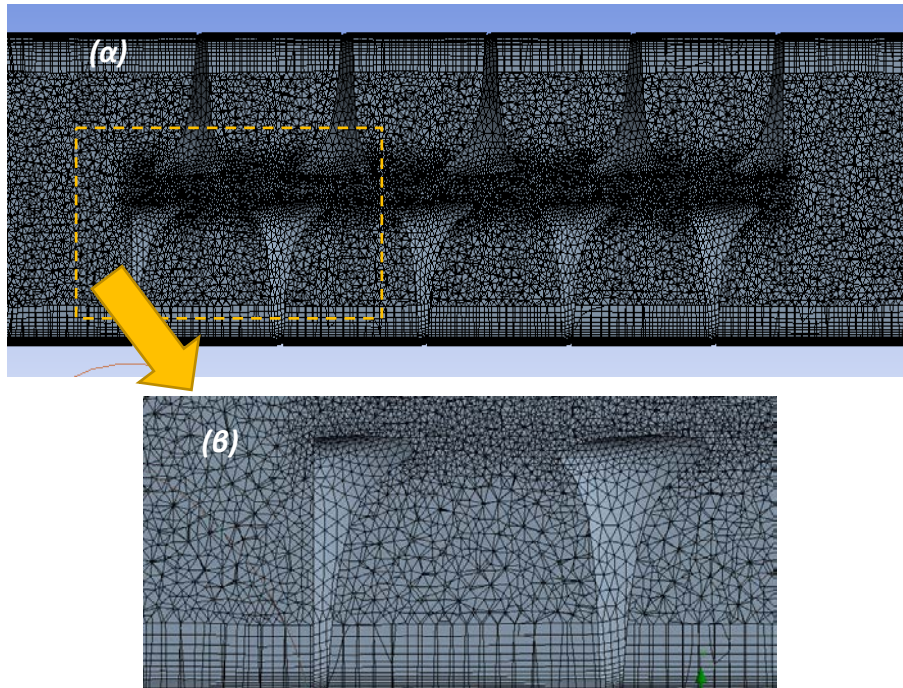
Στο τμήμα *Setup* του *CFX*, επειδή η ροή είναι στρωτή ($Re=9-100$), επιλέχθηκε το μοντέλο *DNS* και έγινε ο ορισμός των οριακών συνθηκών του προβλήματος:

- Οριακή συνθήκη στην είσοδο (*inlet*): ταχύτητα 0.003-0.033m/s
- Οριακή συνθήκη στα τοιχώματα (*wall*): συνθήκη μη ολίσθησης (*no-slip*).
- Οριακή συνθήκη στην έξοδο (*outlet*): σχετική πίεση 0 Pa.

Κατά τις προσομοιώσεις για λόγους απλοποίησης θεωρήθηκε ότι στο μ-αναμίκτη ρέουν δύο ρευστά, τα οποία έχουν τις φυσικές ιδιότητες του νερού και συντελεστή διάχυσης το συντελεστή αυτοδιάχυσης του νερού ($1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$).

Στο τμήμα επίλυσης χρησιμοποιείται η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων (*finite volume*), ο αλγόριθμος επίλυσης *SIMPLEC* για τη σύζευξη της πίεσης και της ταχύτητας και η μέθοδος *QUICK* για τη

διακριτοποίηση των εξισώσεων ορμής^[5]. Οι προσομοιώσεις εκτελέστηκαν με αριθμό επαναλήψεων (*iterations*) που εξασφαλίζουν την ικανοποιητική μείωση των υπολειπόμενων ποσοτήτων (*residuals*) μάζας και ορμής (10^{-12}).



Σχήμα 4. α) ο χώρος ροής και το πλέγμα και β) λεπτομέρεια του πλέγματος.

Για την ποσοτικοποίηση της ανάμιξης χρησιμοποιήθηκε ο δείκτης ποιότητας ανάμιξης^[4], *IME*, ο οποίος σε μια διατομή **A** ορίζεται ως:

$$IME = 1 - \frac{\sqrt{\int_A (c - \bar{c})^2 dA}}{\sqrt{\int_A (\bar{c})^2 dA}} \quad (1)$$

όπου c η συγκέντρωση της ουσίας σε ένα κελί του πλέγματος και \bar{c} η μέση συγκέντρωση σε όλη τη διατομή.

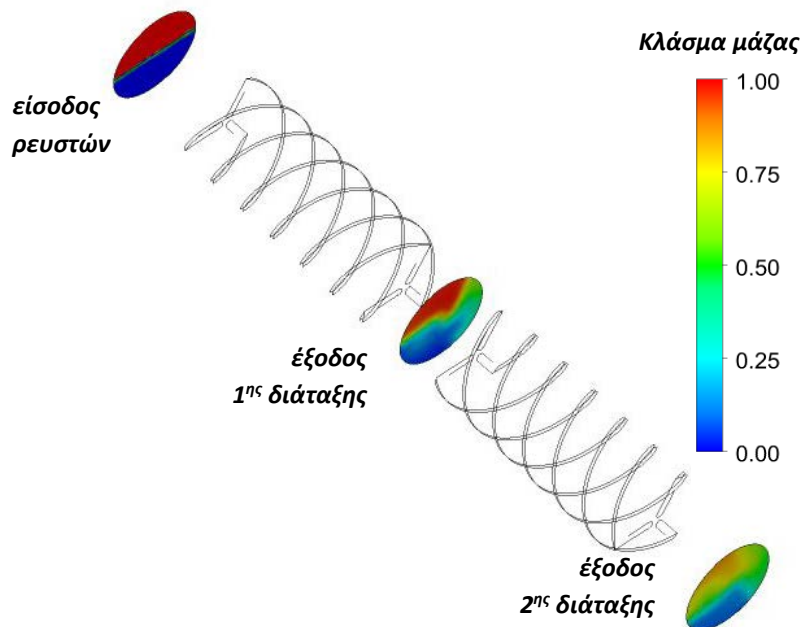
Για τη σύγκριση των διαφόρων περιπτώσεων που εξετάστηκαν, υπολογίσθηκε ο *IME* στην έξοδο του αγωγού. Στον **Πίνακα 2** παρουσιάζονται οι περιπτώσεις που εξετάστηκαν, καθώς και τα αντίστοιχα αποτελέσματα για την πτώση πίεσης στον αγωγό και την τιμή του δείκτη ποιότητας ανάμιξης (*IME*) στην έξοδο του αγωγού.

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

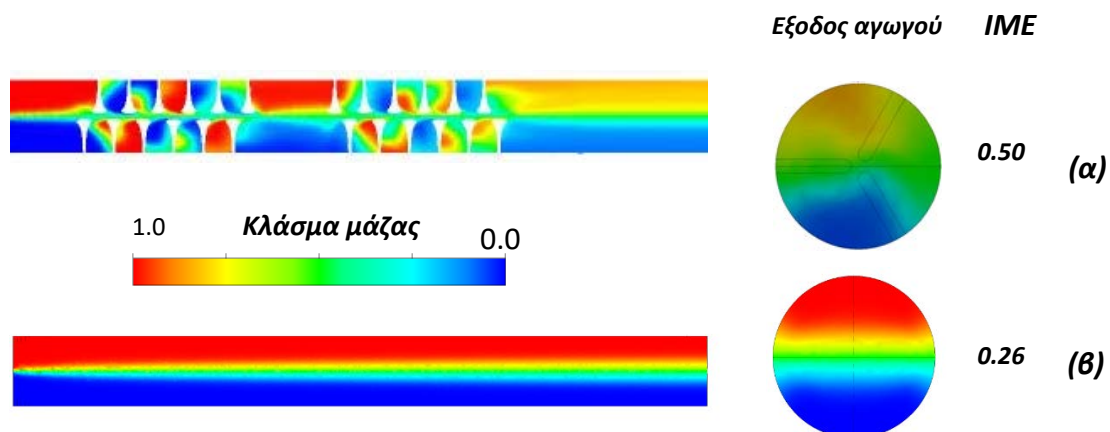
Οι προσομοιώσεις έδειξαν ότι το μήκος της διαδρομής που διανύει το ρευστό μετά την έξοδο του από τη συσκευή δημιουργίας στροβιλώδους ροής δεν βελτιώνει την αποτελεσματικότητα της ανάμιξης, επειδή στην περίπτωση αυτή γίνεται κυρίως με μοριακά μέσα. Για το λόγο αυτό δοκιμάστηκε η εισαγωγή αμέσως μετά την έξοδο της πρώτης συσκευής μιας δεύτερης όμοιας συσκευής αλλά με αντίθετη φορά πτερυγίων και η παρακολούθηση της πορείας της ανάμιξης σε

τρεις διατομές του αγωγού, δηλαδή μετά την έξοδο από την πρώτη διάταξη, τη δεύτερη διάταξη και στην έξοδο του αγωγού (**Σχήμα 5**).

Στο **Σχήμα 6**, όπου συγκρίνεται η πορεία της ανάμιξης στην υπό μελέτη διάταξη με αυτή σε έναν ευθύγραμμο αγωγό ίδιων διαστάσεων, είναι εμφανής συνεισφορά της προσθήκης της συσκευής δημιουργίας στροβιλώδους ροής στην ενίσχυση της ανάμιξης (διπλασιασμός του δείκτη *IME*).



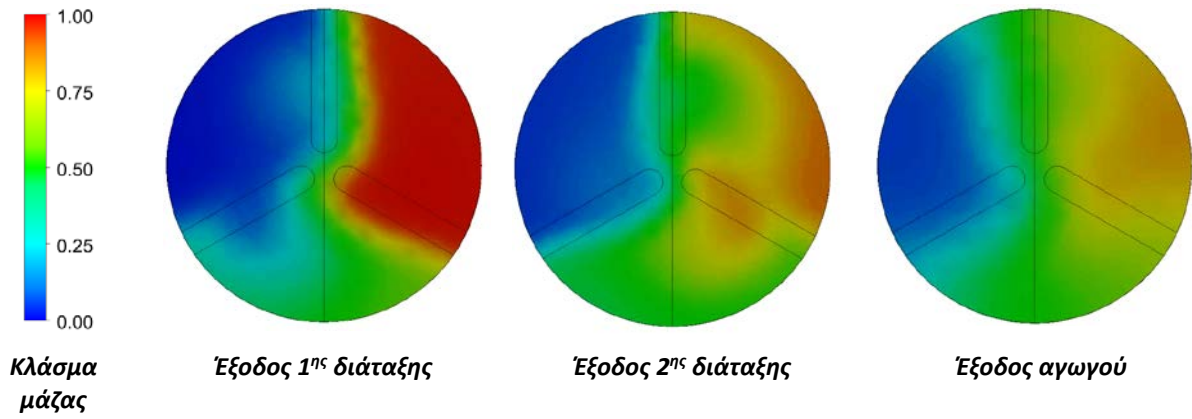
Σχήμα 5. Διατομές του αγωγού όπου παρακολουθείται η ποιότητα της ανάμιξης.



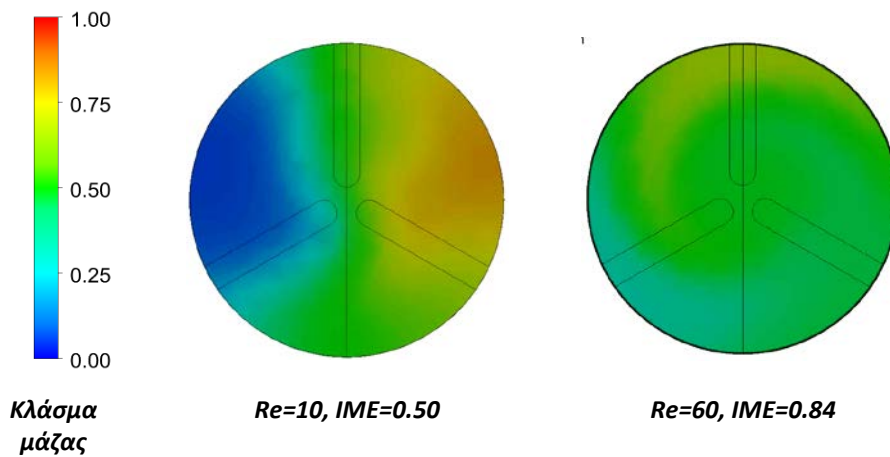
Σχήμα 6.: Κατανομή της συγκέντρωσης μάζας α) σε αγωγό με δυο διατάξεις και β) σε αγωγό χωρίς διάταξη ($Re=10$).

Στο **Σχήμα 7** παρουσιάζεται το κλάσμα μάζας στις τρεις διατομές του αγωγού (**Σχήμα 5**) για την περίπτωση *DPO* (**Πίνακας 2**). Είναι εμφανής η βελτίωση της ανάμιξης μετά τη διέλευση από τη 2^η συσκευή, ενώ υπάρχει αμελητέα περαιτέρω ενίσχυση της ανάμιξης μέχρι την έξοδο του αγωγού.

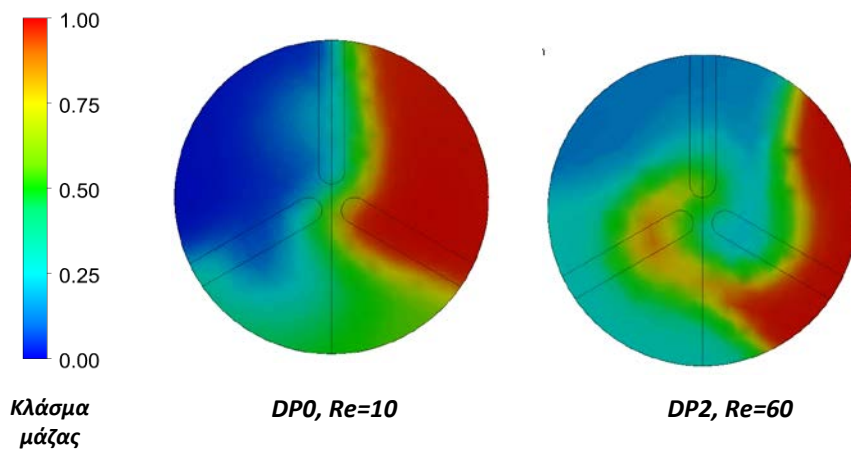
Όπως ήταν αναμενόμενο, όταν αυξάνεται ο αριθμός *Re* ενισχύεται η ένταση της στροβιλώδους ροής και κατά συνέπεια βελτιώνεται η ανάμιξη (**Σχήμα 8**). Αντίθετα, όπως φαίνεται στο **Σχήμα 9** η αύξηση του *Re* δεν έχει τόσο σημαντική επίδραση στην ομοιομορφία της συγκέντρωσης μετά την πρώτη διάταξη.



Σχήμα 7. Κατανομή της συγκέντρωσης σε τρεις διατομές του μ-αναμίκτη, $Re=10$.



Σχήμα 8. Επίδραση του αριθμού Re στην ποιότητα της ανάμιξης στην έξοδο του αναμίκτη (περιπτώσεις DP0 και DP2)



Σχήμα 9. Επίδραση του αριθμού Re στην ποιότητα της ανάμιξης στην έξοδο της πρώτης διάταξης.

Πίνακας 2. Χαρακτηριστικές παράμετροι του μ-αναμίκτη

run	στροφές	μήκος πτερυγίου, mm	Re	ΔP (Pa)	IME
DP 0	2	1.75	10	5	0.50
DP 1	2	1.75	21	12	0.72
DP 2	2	1.75	60	45	0.84
DP 3	2	1.75	99	88	0.92
DP 4	3	1.75	10	12	0.66
DP 5	3	1.75	21	30	0.81
DP 6	3	1.75	60	106	0.90
DP 7	3	1.75	99	202	0.97
DP 8	1	1.75	10	2	0.54
DP 9	1	1.75	21	5	0.67
DP 10	1	1.75	60	15	0.73
DP 11	1	1.75	99	29	0.79
DP 12	1.5	1.75	10	3	0.45
DP 13	1.5	1.75	21	7	0.64
DP 14	1.5	1.75	60	26	0.79
DP 15	1.5	1.75	99	52	0.87
DP 16	2	0.5	10	1	0.23
DP 17	2	0.5	21	2	0.21
DP 18	2	0.5	60	4	0.19
DP 19	2	0.5	99	7	0.90

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Οι αρχικές προσομοιώσεις δείχνουν ότι η προτεινόμενη γεωμετρία, δηλαδή η προσθήκη της συσκευής δημιουργίας στροβιλώδους ροής, βελτιώνει σημαντικά την ανάμιξη, ενώ συγχρόνως η πτώση πίεσης διατηρείται σε χαμηλά επίπεδα (<200 Pa). Στο επόμενο στάδιο της μελέτης θα κατασκευασθεί σε εκτυπωτή 3D ένας πρότυπος μ-αναμίκτης, όπου θα γίνουν πειράματα ώστε να αξιολογηθεί ο κώδικας. Στη συνέχεια χρησιμοποιώντας τον αξιολογημένο κώδικα θα γίνουν προσομοιώσεις για τιμές των παραμέτρων που θα επιλεγούν με μεθοδολογία Σχεδιασμού Πειραμάτων (*Design of Experiments, DOE*). Τελικός στόχος είναι να διαμορφωθούν, με βάση τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων και χρησιμοποιώντας μεθοδολογία *Επιφανείας Απόκρισης (Response Surface Methodology, RSM)*, κατάλληλες σχεδιαστικές εξισώσεις που, για δεδομένες τιμές των σχεδιαστικών παραμέτρων, θα υπολογίζουν την πτώση πίεσης και την ποιότητα της ανάμιξης σε έναν τέτοιου τύπου μ-αναμίκτη.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Hessel V, Lowe H, Schönfeld F. (2005) *Chem. Eng. Sci.*, 60(8–9):2479–2501.
- [2] Mouza AA, Patsa C-M, Schönfeld F. (2008) *Chem. Eng. Res. Des.* 86:1128-1134.
- [3] Kanaris AG, Mouza AA. (2011) *Chem. Eng. Sci.* 66(21):5366-5373.
- [4] Kanaris AG, Stogiannidis IA, Mouza AA, Kandlikar SG. (2015) *Heat Transfer Eng.* 36(13):1122-1131.
- [5] Versteeg HK, Malalasekera W. (1995) *Longman Press, London, UK*