



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ  
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ  
ÚSTAV PROCESNÍHO A EKOLOGICKÉHO  
INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING  
INSTITUTE OF PROCESS AND ENVIRONMENTAL  
ENGINEERING

## VÝPOČTY PROUDĚNÍ V MÍCHANÉM REAKTORU S PLOVOUCÍMI ČÁSTICEMI

COMPUTATIONS OF FLUID FLOW IN STIRRED REACTOR WITH FLOATING PARTICLES

DIPLOMOVÁ PRÁCE  
MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE  
AUTHOR

BC. ISTVÁN FÖLDVÁRY

VEDOUCÍ PRÁCE  
SUPERVISOR

DOC. ING. JIŘÍ HÁJEK, PH.D.

BRNO 2014

**VLOŽIT ORIGINAL ZADÁNÍ**

## **Abstrakt**

Cílem diplomové práce je sestavení a následná simulace CFD modelu míchaného reaktoru za přítomnosti plovoucích částic. V první části práce se souhrnně popisuje teorie míchání nutná ke zvládnutí definovaných cílů práce, provede se rešerše odborné literatury o míchaných reaktorech s plovoucími částicemi. Druhá, praktická část zahrnuje sestavení výpočtového CFD modelu reaktoru, provedení simulace, a porovnání experimentálních dat z dostupné literatury.

## **Abstract**

The main goal of this master's thesis is to investigate the drawn down of floating particles in mechanically stirred vessels. The first part of the thesis summarizes necessary theory to cope with defined objectives of the thesis. The literature review of mixing reactors with floating particles can be found in this part of the work as well. The second part of the master's thesis includes the preparation of the stirred tanks CFD model, simulation and comparing of experimental data from literature, as well.

## **Klíčová slova**

## **Keywords**

---

Míchání

Mixing

Míchadlo s rovnými skloněnými lopatkami

Pitched blade turbine

Zvětšování měřítka

Scale-up

## **Bibliografická citace**

**FÖLDVÁRY, I.:** *Výpočty proudění v míchaném reaktoru s plovoucími částicemi.* Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2014. 60 s. Vedoucí diplomové práce doc. Ing. Jiří Hájek, Ph.D.

## **Prohlášení o původnosti**

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracoval samostatně pomocí uvedené literatury pod vedením vedoucího diplomové práce doc. Ing. Jiřího Hájka, Ph.D.

V Brně, 30. května 2014

.....

(podpis)

## **Poděkování**

Chtěl bych poděkovat vedoucímu diplomové práce, doc. Ing. Jiřímu Hájkovy, Ph.D. za pomoc a trpělivost při psaní této práce.

## Seznam symbolů

Symbol	Význam	Jednotka
a	zrychlení	$\text{ms}^{-2}$
A	exponent	[-]
$A_i$	normálový vektor plochy	[-]
B	exponent	[-]
b	šířka narážek	m
C	vzdálenost od dna nádoby	m
$C_i$	vektor ze středu buňky do středu sousední buňky	[-]
d	průměr	m
D	průměr míchadla	m
$D_H$	charakteristický rozměr	m
$F_i$	je vektorem ze středu buňky ke středu plochy	[-]
Fr	Froudovo číslo	[-]
g	tíhové zrychlení	$\text{ms}^{-2}$
H	výška kapaliny	m
K	kinetická energie turbulence	J
k	přepočítávací faktor	[-]
L	délka lopatek	m
n	exponent	[-]
N	rychlost otáčení míchadla	rpm
Ne	účinná frekvence otáčení míchadla	rpm
$N_p$	příkonové číslo	[-]
P	příkon	W
$P_o$	příkonové číslo	[-]
Re	Reynoldsovo číslo	[-]
$Re_{imp}$	Reynoldsovo číslo na lopatkách	[-]
$r_k$	poloměr koule	m
S	bezrozměrné číslo	[-]
$S_{el}$	plocha elipsy	$\text{m}^2$
t	čas	s
T	průměr nádrže	m
$T_q$	moment	Nm
u	rychlost	m/s
v	rychlost	m/s
V	objem	$\text{m}^3$
$V_{el}$	objem elipsy	$\text{m}^3$
x	tloušťka lopatek míchadla	m
X	relativní hmotnostní poměr	[-]

## Seznam řeckých symbolů

Symbol	Význam	Jednotka
$\Gamma$	geometrické simplex	[–]
$\varepsilon$	rychlost disipace kinetické energie	$\text{m}^2\text{s}^{-3}$
$\eta$	účinnost	[–]
$\vartheta$	kinematická viskozita	$\text{m}^2\text{s}^{-1}$
$\mu$	dynamická viskozita	Pa.s
$\sigma$	tenzor celkových napětí	[–]
$\tau$	tenzor napětí	[–]
$\omega$	merná rychlost disipace kinetické energie	[–]
$\rho$	hustota	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$

## Seznam indexů

1	menší reaktor
2	větší reaktor
avg	průměrní
irz	vnitřní rotační zóna
JD	rychlost při stahování částic
JD2S	rychlost při stahování částic (scale-up výpočtem)
l	kapalina (liquid)
max	největší
p	částice
poly	polyetylen
r	relativní
t	translační
x	ve směru osy x
y	ve směru osy y
z	ve směru osy z

# Obsah

1. Úvod.....	- 9 -
1.1. Motivace práce.....	- 9 -
1.2. Cíl práce.....	- 10 -
2. Míchané reaktory s plovoucími částicemi .....	- 11 -
3. Simulace reaktorů s plovoucími částicemi.....	- 14 -
3.1. CFD modelování míchaných reaktorů.....	- 15 -
3.1.1. Single reference frame model .....	- 16 -
3.1.2. Multiple Reference Frame.....	- 17 -
3.1.3. Mixing Plane Model (MPM) .....	- 18 -
3.1.4. Sliding Mesh Model (SMM) .....	- 19 -
3.1.5. Vliv turbulence.....	- 19 -
3.2. Modelování reaktorů za přítomnosti tří fází.....	- 21 -
4. Metody zvětšování měřítka míchaných nádrží .....	- 24 -
4.1. Teorie podobnosti.....	- 24 -
4.2. Kritéria podobnosti.....	- 25 -
5. Popis reaktoru.....	- 30 -
6. Výpočtová síť.....	- 32 -
7. Příprava výpočtu.....	- 36 -
7.1. Souhrn výpočetních metod.....	- 36 -
7.2. Kontrola předpokladu turbulence.....	- 39 -
8. Výstupy simulace.....	- 42 -
8.1. Reaktor T=0,67m .....	- 42 -
8.1.1. Příkonové charakteristiky míchadla .....	- 44 -
8.2. Reaktor T=2,67 m .....	- 45 -
8.2.1. Příkonové charakteristiky míchadla .....	- 48 -
9. Scale-up.....	- 50 -
9.1. Scale-up výpočet pomocí P/V kritéria .....	- 50 -
9.2. Scale-up výpočet pomocí Froudova kritéria.....	- 50 -
9.3. Scale-up výpočet pomocí konstantní obvodové rychlosti .....	- 51 -
9.4. Scale up výpočet pomocí specifického momentu .....	- 52 -
9.5. Shrnutí .....	- 52 -
10. Závěr.....	- 54 -
Seznam použité literatury.....	- 56 -



# 1. Úvod

Míchání je proces obecně rozšířený, patří k nejstarším operacím chemického průmyslu i denního života. Pod pojmem míchání se obvykle rozumí dokonalé promíchání jednotlivých komponentů, promíchání veškerého materiálu uvnitř daného celkového objemu. Na průmyslové úrovni se pod pojmem míchání vesměs jedná o míchání nucené, dodáním vnější energie do uzavřeného systému, aparátů nazývaných míchací zařízení.

Účelem mechanického míchání je obvykle homogenizace roztoků nebo směsí, intenzifikace fyzikálních jevů jako přestup tepla, sdílení hmoty, rozptylování pevných částic suspenzí, výroba emulzí omezeně mísitelných kapalin atd.

Sdílení tepla a hmoty probíhá rovněž v nehomogenních systémech jako systém kapalina – kapalina, kapalina – plyn nebo také kapalina – plyn, přenos hmoty může být doprovázen chemickými reakcemi. Větší část starší klasické literatury (Strek, *Míchání a míchací zařízení*, Šob, *Hydromechanika*) věnuje pozornost právě již zmíněným dvousložkovým nehomogenním systémům, popisuje vztahy příkonu míchadla i změny v režimech sdílení tepla a hmoty. Míchání směsí za přítomnosti všech tří fází dohromady se literatura věnuje výhradně okrajově [2] [3] [4].

V chemickém a příbuzných průmyslových odvětvích se využívají ovšem míchací reaktory za přítomnosti i více, než dvou fází (systémy kapalina – plyn - pevné látky). Ve většině průmyslových míchacích systémů se provádí vícefázové míchání s částicemi těžšími, než kapalina. Z tohoto důvodu získaly tyto procesy větší výzkumnou pozornost. Přesto v případě několika aplikací jsou pevné látky lehčí než kapalina, stahování těchto částic vyžaduje vnější přísun energie.

V těchto reaktorech patří stahování plovoucích tuhých těles mezi jedny z důležitých cílů míchacího procesu. Zpracování prášků, zpracování v potravinářském průmyslu, čištění odpadních vod, procesy kvašení, homogenizace látek, tvorba emulzí a suspenzí patří mezi nejznámější příklady, kde se stahování částic pod hladinu kapaliny může vyžadovat na každodenní úrovni. Navzdory značně rozšířenému využívání procesů se stahováním částic, literatura zatím nezná podrobný obecný popis těchto procesů.

## 1.1. Motivace práce

Diplomová práce se zabývá s mícháním systému za přítomnosti plovoucích částic na hladině kapaliny. V našem případě se v míchaném reaktoru nachází jako kapalně prostředí voda, na povrchu kapaliny plavou částice polyetylenu, které mají nižší hustotou od kapalného média. Výzkumu problematiky takových systémů je věnováno obecně méně pozornosti, co se týče literatury teoretické i experimentální. Právě menší prozkoumanost míchaných reaktorů s plovoucími částicemi je nejvýznamnější motivací zadané závěrečné práce.

## 1.2. Cíl práce

Zadání závěrečné práce definuje tři základní cíle tu předkládané práce:

- Prvním cílem práce je rešerše odborné literatury o míchaných reaktorech s plovoucími částicemi a jejich simulacích.
- Druhým hlavním cílem je sestavení numerického výpočtového modelu systému s plovoucími částicemi.
- Třetím cílem je provedení simulace modelového zařízení, analýza výsledků a porovnání s dostupnými experimentálními daty.

## 2. Míchané reaktory s plovoucími částicemi

Promíchávání a míchání kapalin v míchaných reaktorech váže dlouhodobou pozornost. Rychlý vývoj numerických výpočetních možností (Computational Fluid Dynamics - CFD) umožnil použití těchto výpočetních systémů jako vhodný nástroj pro zkoumání podrobných informací o různých vlastnostech toků v nádržích.

Mícháním systémů s částicemi lehčími než kapalina se v posledním období zabývalo několik autorů. Mezi ně patří zejména Kuzmanič a Ljubičić [5], Kuzmanič a kol., Özcan-Taşkin [6], Özcan-Taşkin a McGrath [7], Özcan-Taşkin a Wei [8], Khazam a Kresta [9], Waghmare [10] a další. Společným bodem těchto autorů bylo při získání dat pro co nejoptimálnější návrh reaktorů i co nejpřesnější opis dějů probíhajících v reaktorech po dobu míchacího procesu, a pro tento cíl využili také různé typy simulačních nástrojů.

Obecně, ve zmíněné literatuře o míchaných reaktorech s plovoucími částicemi se koncentruje na stahování plovoucích částic pod povrch kapaliny. Částice se mohou zdržovat na hladině z více důvodů. Důvodem může to být velikost částic, horší smáčivost, nebo nižší hustota vůči kapalině [8].

Výzkum identifikoval tři hlavní mechanismy způsobující stahování plovoucích částic [9] [10].

Prvním takovým způsobem stahování je stabilní centrální vír (tangenciální proudění). Vír se chová jako centrifuga, postupně odděluje částice a drží je pod povrchem. Stabilní centrální vír je charakteristický pro nádrže bez narážek. Využití nádrží bez narážek se upřednostňuje obzvláště v potravinářském a farmaceutickém průmyslu, ale rovněž v procesech jako výroba laků a barev, či čištění odpadních vod anebo krystalizace. Míchané reaktory bez narážek jsou vhodné pro míchání kapalin v laminárním režimu proudění, také pro míchací systémy s newtonovskou nebo vysoce viskózní kapalinou [3]. Míchání v reaktorech bez narážek se však vyznačuje výrazně nižší účinností, další nevýhodou může být tvorba až tak silného centrálního víru, která může vést v některých případech k nežádoucí disperzi plynu v kapalně fázi [9] [10].

Dalším způsobem je stahování formou turbulentního pohlcení a „vlastní“ ztržení částice. Při turbulentním pohlcení se hrudy částic na povrchu kapaliny rozbíjejí pomocí malých vírů, která pak stahují částice do cirkulujícího proudu kapaliny. Při „vlastním“ ztržení vtáhne silná objemová cirkulace částice na povrchu kapaliny do středu nebo ke stěnám nádoby, a pak je kontinuálním proudem stahuje do objemu kapaliny [9] [10].

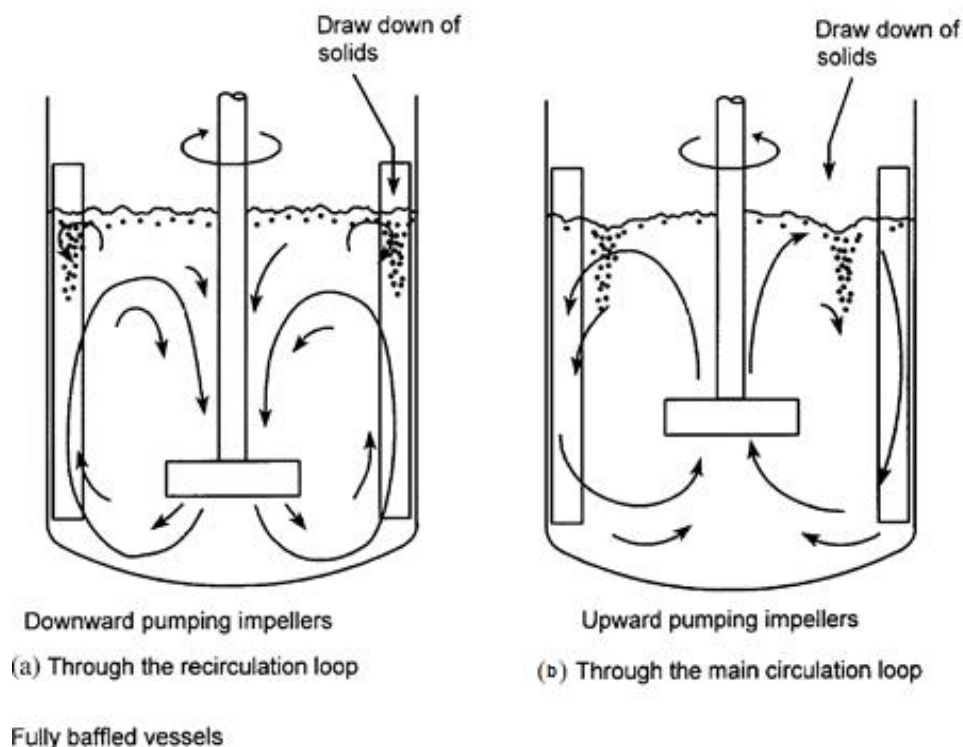
Oproti stahování stabilním centrálním vírem je stahování plovoucích částic turbulentním pohlcením nebo „vlastním ztržením“ efektivnějším mechanismem zpracování částic do objemu kapaliny. Montování narážek rozmístěných pro obvod míchacího zařízení zamezí prosté rotaci kapaliny, tj. potlačí centrální vír, naopak narážky zvyšují intenzitu turbulence [3] [4]. Studie Khazama a Kresty [9] potvrzují, že pro stahování plovoucích částic jsou míchací reaktory s narážkami vhodnější, než míchací reaktory bez narážek.

Co se týče konstrukčního řešení míchacích reaktorů ohledně stahování plovoucích částic z povrchu kapaliny, proces zejména ovlivňuje typ, poloha a ponoření míchadla v nádobě, viskozita pracovního materiálu a počet narážek zařízení. Důležitým faktorem je také energie spotřebována k stahování částic. Výběrem ideálního typu míchadla může být dosaženo značné úspory energie [5] [6] [7] [8].

Obecně, z literatury po přelomu století plyne, že míchadla s radiálním tokem kapaliny jsou pro účely stahování plovoucích částic méně energeticky úsporné. Míchadla se složkou radiálního i axiálního proudění jsou také vhodnější než míchadla ryze s axiálním prouděním [6] [7] [8].

V novější literatuře se většinou jako referenční míchadla využívají míchadla s rovnými skloněnými lopatkami, v některých případech se porovnávají s jinými konvenčními typy míchadel. Míchadla s rovnými skloněnými lopatkami se pravidelně zkoumají v obou provozních režimech, tj. pro režim nahoru tlačícího míchadla, tak i pro režim dolů tlačícího míchadla.

Vliv poměru průměru míchadla k nádrži je také jedním z často sledovaných závislostí. Problémem se částečně zabírali Kuzmanič a Ljubičić [5], celou práci k témě věnoval Özcan-Taşkin a Wei [7]. Podle Kuzmaniče a Ljubičiće [5] lze jako energeticky nejúspornější doporučit konfiguraci při poměru průměru oběžného kola k nádrži mezi 0.33 až 0.41.



Obrázek 1: a, Stahování částic skrz recirkulační smyčky  
b, Stahování částic z povrchu kapaliny mezi hřídelí a stěnou nádrže [7]

Özcan- Taşkinovy [7] studie ukazují, že víry nejsou jediné, které zodpovídají za ztržení částic do kapalného média. Při režimu dolů tlačícího míchadla, je míchadlo montováno (umístěno) blíž ke spodku nádoby, částice se strhávají ke stěnám nádoby skrz recirkulační smyčky.

Při režimu nahoru tlačícího míchadla jde tok směrem od míchadla, přičemž se na povrchu kapaliny pak vytvoří tvary jakoby dómu. Částice se strhávají mezi hřídélí a stěnou nádrže [7].

Všechny tyto doporučení však mají jenom silně obecný charakter. Různá literatura doporučuje v každém případě trocha jinou optimální konstrukci nádrží, či počtu vestaveb. Údaje ohledné míchání jsou vesměs experimentální, dopodrobna známá a také doporučená know-how pro konstrukci a návrh provozních parametrů většiny míchaných reaktorů do dnešního dne neexistuje.

### 3. Simulace reaktorů s plovoucími částicemi

Z teoretických matematických metod se pro výpočty chemického a procesního průmyslu – a tak i pro proudění v míchaných reaktorech - využívá metoda počítačové simulace CFD – počítačem zkoumána dynamika tekutin. Výpočet dynamiky tekutin umožnil rychlý rozvoj výpočetní techniky zhruba od konce šedesátých let minulého století [13].

Výpočtem CFD lze simulovat požadovanou interakci kapalin a plynů s povrchy definovanými okrajovými podmínkami. Princip metody se opírá o numerické řešení diferenciálních rovnic. Výpočetní stabilita a obtížnost metod modelování závisí především na obtížnosti řešeného problému. CFD je náročný, interdisciplinární obor kombinující vědecké poznatky hlavně matematiky, numerických metod, mechaniky kapalin a termomechaniky, nicméně modelování proudění lze odvodit ze tří základních fyzikálních zákonů [1] [2] [11] [13]:

- zákonu zachování energie (energetická rovnice)
- zákonu zachování hybnosti (pohybové rovnice)
- zákonu zachování hmotnosti (rovnice kontinuity)

Systém těchto rovnic - navzdory tomu, že G. G. Stokes a M. Navier rozšířily výlučně Eulerovy rovnice přenosu hybnosti pro neviskózní kapalinu - je v současné době znám pod pojmem Navier-Stokesovy rovnice. Pod tímto pojmem se rozumí úplný systém rovnic popisujících proudění tekutin [11] [13], zahrnující také rovnice přenosu energie a rovnice kontinuity.

Navier-Stokesovy rovnice jsou zapsané obvykle v maticovém tvaru, kde se vyskytují derivace různého řádu, v závislosti či se jedná o derivace podle polohy (první a druhý řád), či podle času (první řád). Derivace podle polohy jsou nelineární, časové derivace v lineárním tvaru. Analytické řešení těchto rovnic zpravidla není reálné, výjimkou některých velmi jednoduchých situací. Hlavním cílem je tehdy pomocí diskretizace získat z rovnic diferenciálních rovnice algebraické. Tyto rovnice se pak na daném fyzikálním modelu a při daných okrajových podmínkách řeší numericky, tj. získávají se přibližné výsledky, kterých přesnost pak ovlivňuje především úroveň diskreditace. Definovanou geometrií a stanovením počátečních a okrajových podmínek se získá jedno konkrétní řešení pro jeden daný stav problému, z čeho se pak počítá dál [1] [2] [13].

Systém algebraických rovnic obsahuje řádově milióny neznámých, řešení soustavy rovnic se provádí pomocí bodových implicitních metod jako Gauss-Seidlova metoda [13]. Numerické metody nejčastěji využívané pro řešení systémů parciálně diferenciálních rovnic jsou metoda konečných diferencí (MKD), metoda konečných prvků (MKP), a metoda konečných objemů (MKO, FVM - Finite Volume Method) [1] [13].

V CFD modelování tekutin je z daleka nejpoužívanější metodou diskretizace metoda konečných objemů [13]. Záměrem výpočtu je v dané časové škále a dané geometrii získat potřebné fyzikální údaje.

Od numerické simulace proudění (CFD), ačkoli co nejvíce přemyšlené a akurátní, se nikdy nemůže očekávat naprosto přesný opis probíhajících dějů. Navzdory tomu se modelování využívá v stále rostoucím měřítku, a to z toho důvodu, že numerická simulace proudění má několik obecních výhod [13] vzhledem k experimentálnímu provedení různých zkoušek či návrhů:

- CFD modelování je mnohem levnější, než experimentálně provedené studie, i přes mnohdy vyšší náročnost metody na výpočetní výkon a výpočetní čas počítače.
- CFD modelování umožňuje získání použitelných výsledků ve velké šířce potenciálně měnících se vstupních dat a parametrů, bez nutnosti stavby a zkoušení dalších a dalších finančně nákladných reálných fyzických prototypů, nákupu drahé měřicí techniky, postavení nebo nájmu objektů nutných k provedení simulací (např. vzduchové kanály).
- CFD modelování umožňuje získání přibližné prostorové rozložení průtokových parametrů v celém hlídaném objemu (tlaky, teplota, rychlosti fyzikální vlastnosti), v případě experimentálních zkoušek lze získat data pouze jenom ve vybraných částech zařízení.
- CFD modelování umožňuje digitální rekonstrukci trojrozměrného pole proudění v celém objemu, vizualizace lze využít pro eventuální lepší pochopení hydrodynamických procesů.

### **3.1. CFD modelování míchaných reaktorů**

Míchání v míchaných reaktorech je jedním z nejčastějších operací, ale představuje taky velkou výzvu v oblasti numerické simulace. Nádrže mimo míchadel mohou obsahovat různé vestavby, jako narážky, co při CFD modelování vyžaduje zvážení mnoha aspektů výpočtu. Simulace se provádí jak ve dvou, tak ve třech rozměrech. V případě 2D simulací se předpokládá osová souměrnost nebo nezávislost geometrie a pole proudění na uhlovém rozměru [2] [11] [13].

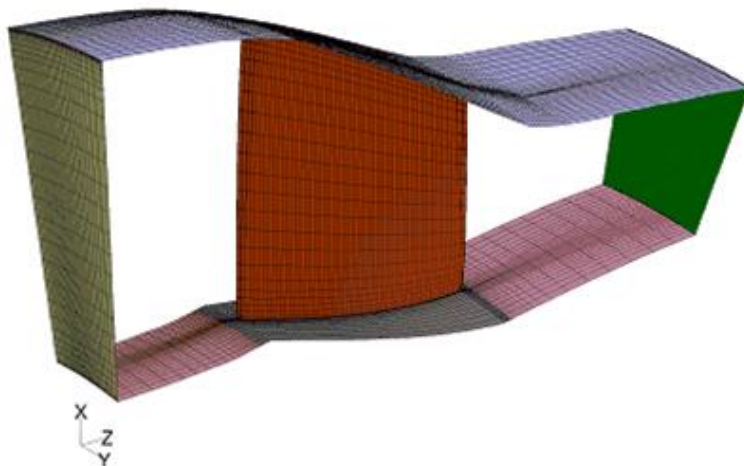
V literatuře se vyskytuje celá řada publikací zabývajících se prouděním v míchaných reaktorech, nicméně drtivá část z nich se nezabývá prouděním za přítomnosti všech tří fází. Vícefázové směsi se velmi často vyskytují v procesním průmyslu, jsou to složitější situace, pro které modelování ještě není tak vyvinuté. Softwary založené na principu CFD modelování – např. Ansys Fluent, CFX - však poskytují několik použitelných metod pro vyšetřování vysoce komplexního proudění kapalin v míchaných reaktorech [2].

Míchání v reaktorech je pohyb vesměs rotační, které se v zásadě můžou řešit čtyřmi způsoby [2], které postupně čím více nabírají na komplexitě. Čtyři základní algoritmy řešení rotačních pohybů jsou:

- Single reference frame model (SRF)
- Multiple reference frame model (MRF)
- Mixing plane model (MPM)
- Sliding mesh model (SMM)

Tři ze simulačních modelů počítají v ustáleném stavu, sliding mesh model je časově neustálený [2] [11]. Systémy s jediným prvkem, kde lze celý objem domény uvažovat jako část jednoho referenčního rámce, se obvykle řeší použitím SRF modelu. Modelování systému s více komponenty – narážky v míchaném reaktoru – vede k rozdělení objemu do více kapalných zón, které jsou přepojené v rozhraní hranic (okrajích) jednotlivých zón. Pro tyto problémy jsou dostupné tři rozličné modelovací algoritmy (MRF, MPM, SMM), které rozlišuje úroveň interakce na rozhraní jednotlivých zón. MRF model si interakce na rozhraní nevšímá, MPM model ignoruje obvodové neustálenosti zprůměrováním na rozhraních [2]. Nejkomplexnějším i nejakuratnějším je sliding mesh model, ten se však vyznačuje i nejvyššími nároky na výpočetní techniku, vyšší výpočetní čas se tedy automaticky promítá do finanční náročnosti metody [2] [11] [13].

### 3.1.1. Single reference frame model



Obrázek 2: Lopatka ve výpočtové doméne SRF modelu

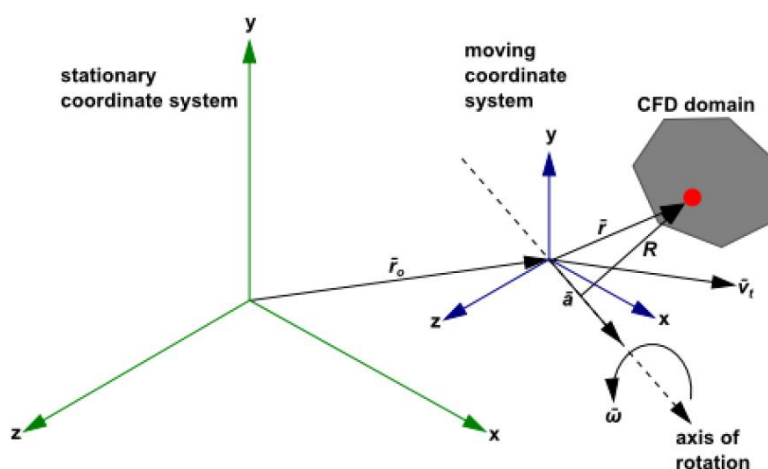
Existují problémy, které vyžadují aplikaci celkové výpočtové domény jako jedinou rotující vztažnou soustavu. Tento přístup se dá využívat pro jednu kapalnou oblast. V programu Ansys Fluent lze tuto oblast rozdělit do více navzájem spojených kapalných zón, ale každá kapalná zóna musí mít stejnou uhlovou rychlost a osu otáčení. SRF model řeší pohybové rovnice v celé doméně rotujícího rámu [2]. Úhlová rychlost rotačního mechanického míchadla se využije jako uhlová rychlost rotujícího rámu. SRF model není vybaven pro pohyb prvků,



jako jsou narážky [2]. Tento model je tedy vhodný pro osově souměrné míchané reaktory bez narážek a jiných vestaveb [11].

### 3.1.2. Multiple Reference Frame

MRF model je jednodušší ze dvou dostupných variant pro problémy vyžadující rozdělení kapalných oblastí na více zón. Je modifikací SRF modelu. Změnou oproti SRF modelu bylo, že se využívá více než jednoho rotujícího (anebo nerotujícího) referenčního rámu, umožňuje simulace míchaných reaktorů s vestavbami [2] [11]. Podobně, jako SRF model, se jedná o časově ustálený přístup. MRF model nebere v úvahu relativní pohyb pohyblivé zóny vztahované k přilehlé oblasti, síť pro výpočet zůstává stacionární [11].



Obrázek 3: Výpočtová zóna vzhledem k ohnisku rotující oblasti

Výpočtová zóna je definovaná vzhledem k rotující oblasti, jakýkoli bod v oblasti je definován vektorem z ohniska rotující oblasti. Rychlost tekutin z nepohyblivého do rotujícího rámu může být transformována rovnicemi rychlosti [2]:

$$\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{u}_r \quad (1)$$

$$\vec{u}_r = \vec{v}_t + \vec{\omega} \times \vec{r} \quad (2)$$

Kde  $\vec{v}_r$  je relativní (z pohledu pohyblivého rámu),  $\vec{v}$  je absolutní rychlost (rychlost z pohledu stacionárního rámu),  $\vec{u}_r$  je rychlost pohyblivé zóny vzhledem k inerciální vztahné oblasti,  $\vec{v}_t$  je translační rychlost a  $\vec{\omega}$  je rychlost uhlová. Hybnost je zachycena pomocí Navier-Stokesových rovnic [2]:

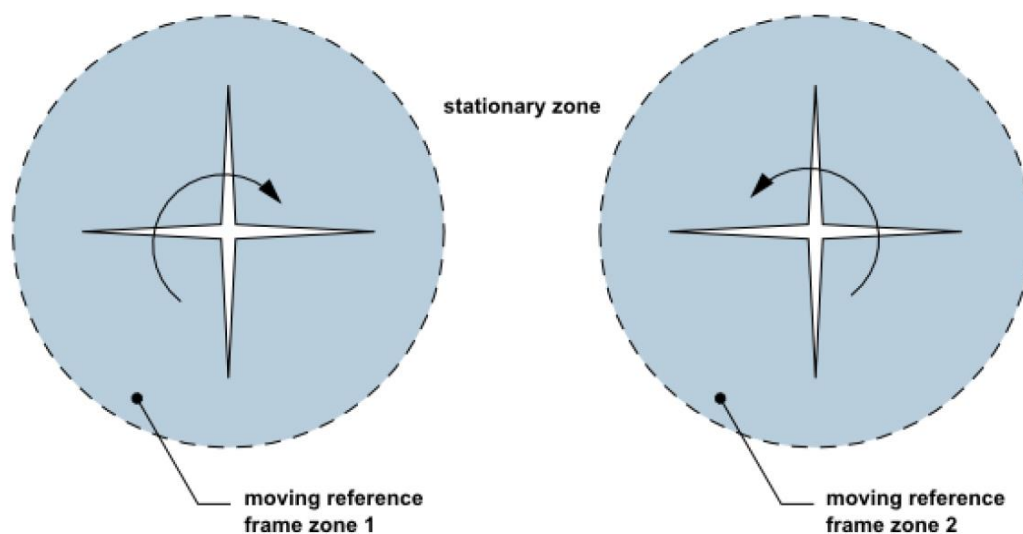
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}_r) + \nabla(\rho \vec{v}_r \vec{v}_r) + \rho(2\vec{\omega} \times \vec{v}_r + \vec{\omega} \times \vec{\omega} \times \vec{r} + \vec{a} \times \vec{r} + \vec{a}) = -\nabla p + \nabla \bar{\tau}_r + \vec{F} \quad (3)$$

$$\text{kde } \vec{\alpha} = \frac{d\vec{\omega}}{dt}, \vec{a} = \frac{d\vec{v}_t}{dt}$$

Rovnice zahrnuje čtyři další formy zrychlení. První jsou Coriolisovo ( $2\vec{\omega} \times \vec{v}_r$ ) a centripetální zrychlení ( $\vec{\omega} \times \vec{\omega} \times \vec{r}$ ), třetí a čtvrtá je zrychlení uhlové ( $\vec{a} \times \vec{r}$ ) a

zrychlení translační rychlosti ( $\vec{a}$ ). Při konstantní translační a úhlové rychlosti, tyto části rovnice zmizí.  $\bar{\tau}_r$  je tenzor napětí [2].

Při aplikaci MRF modelu, rotační vztažná oblast obsahuje míchadlo, které se vzhledem k této oblasti nepohybuje. Narážky a jiné vestavby se nacházejí v nerotující oblasti. Vestavby, podobně jako míchadlo v rotační oblasti, se vzhledem k nerotující oblasti taky nepohybují. Skutečnost, že se využívá více, než jednoho referenčního rámu umožňuje například i modelování nádrží s více míchadly, které se nacházejí na jedné společné hřídeli. Oblast obklopující rotační zónu musí být dokonalá plocha opsaná rotací křivky kolem středové přímky. Proud v každé pohybující se zóně je řešen pomocí rovnic MRF modelu. Když se jedná o zónu stacionární, rovnice se zjednoduší na jejich stacionární formu. Míchadlo se samo v tomto typu výpočtu nepohybuje [11].



Obrázek 4: Rotující oblasti ve stacionární zóně, MRF model [2]

Je-li v míchaném reaktoru s narážkami míchadlo namontováno na centrální hřídeli, orientace lopatek míchadla vzhledem k narážkám v průběhu řešení zůstává stejná. Je-li interakce mezi narážkami a míchadlem slabší, na relativní orientace míchadla s narážkami nezáleží [11]. Tento model se proto doporučuje pro simulace, ve kterých interakce míchadla a narážek není tak dominantní. Pro systémy se silnou interakcí mezi statorem a rotorem se doporučuje sliding mesh model [11].

MRF model je sice přístup jednoznačně aproximační, může poskytnout adekvátní představu o toku tekutin v mnoha aplikacích. Pro míchání v míchaných reaktorech - z důvodu, že v nádržích je interakce míchadla a narážek relativně slabá – může být MRF model vhodným přístupem [2] [11].

### 3.1.3. Mixing Plane Model (MPM)

Modifikovanou verzí MRF modelu je Mixing Plane Model (MPM). V MPM přístupu jsou veličiny z jedné oblasti proudového pole předávány přes MRF

rozhraní jako okrajové podmínky, veličiny jsou prostorově středěné v obvodovém směru. Po průměrování se odstraní všechny úhlové závislosti na rozhraní, veškeré proměnné jsou funkce pouze axiální a radiální polohy. Tento postup je využitelný pro systémy, kde se blízko sebe v relativním pohybu nachází mnoho rotorů a statorů. Pro účely modelování míchaných reaktorů se MPM model právě z důvodů již zmíněného průměrování ve veliké míře příliš nevyužívá [2] [11].

#### **3.1.4. Sliding Mesh Model (SMM)**

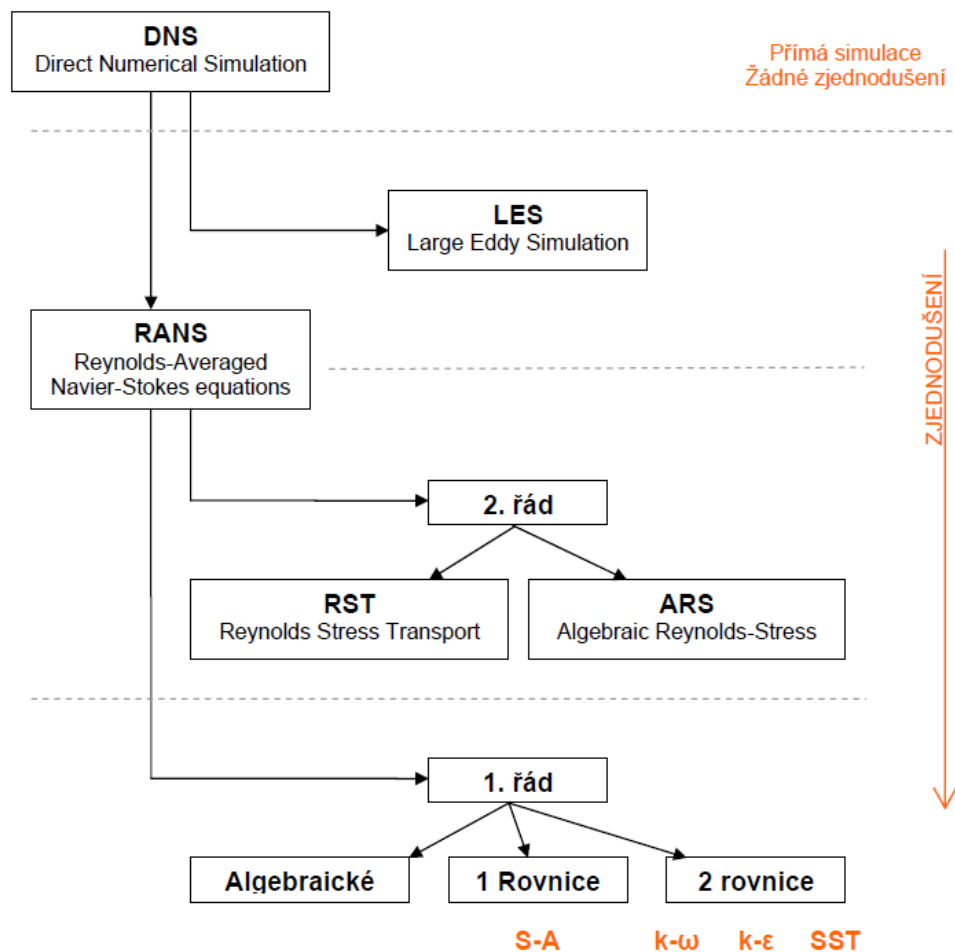
Sliding Mesh Model modeluje interakci mezi pohybující se a stacionárními oblastmi v závislosti na času. Prostorová diskretizace (mesh, výpočtová síť) obklopující rotační míchadlo se během řešení fyzicky pohybuje. Jednotlivé zóny jsou vzájemně spojeny rozhraním, která nemusí navazovat na hranice buněk výpočtové sítě (non-conformal mesh) [2]. Rychlost rotačního míchadla je vzhledem k pohybující se oblasti výpočtové sítě nulová, jako i nádrže, nárážek a ostatních vestaveb nacházejících se v oblasti stacionární oblasti výpočetní sítě. Pohyb míchadla je modelován realisticky, pohybující se výpočetní síť obklopující míchadlo vede k časově akurátní simulaci interakce míchadla a nárážek nacházejících se v reaktoru [2] [11]. Pohyb sítě není spojitý, ale probíhá v malých, diskrétních krocích. Po každém takovém kroku se řeší sada konzervativních rovnic iteračním způsobem, až kým se nedosáhne konvergence. Síť se znovu pohne a konvergence se znovu získává iteračním způsobem. Při každém z těchto časově kvázi-stabilních výpočtů prochází informace z pohybujících se oblastí do stacionární zóny a zpátky [11]. Buňky si během výpočtu zachovávají svůj původní tvar i objem. Aby bylo možné otáčet jednotlivé oblasti sítě, hranice mezi zónami musí být plochy opsané rotací křivky kolem středové přímky. Sliding mesh model je nej přesnější a nejvíce informativní postup řešení simulací míchaných reaktorů, je však výpočtově a časově mnohem náročnější, jako v jisté míře aproximační MRF model [2] [11].

#### **3.1.5. Vliv turbulence**

Turbulence je další jev, jehož výskyt se dá předpokládat v téměř každé úloze míchání, zejména za přítomnosti vyšších úhlových rychlostí. I když se jedná o jev často přítomný, jehož podstata do dnešního dne zůstává do značné míry neznámá. Přes méně známé zákonitosti fyzikálního procesu, jedním z důležitých hledisek ovlivňujících akurátnost a přesnost numerické simulace bude volba turbulentního modelu proudění [2] [11] [13].

Mezi jednoznačně nejvyužívanějšími přístupy modelování turbulence v míchaných reaktorech patří dvou-rovnicové momentové modely prvního řádu, které patří do skupiny Reynoldsovým způsobem zprůměrovaných Navier-Stokesových rovnic [13]. Využívají dvě parciální diferenciální rovnice. Jedna z nich obvykle zahrnuje kinetickou energii turbulence, druhou rovnicí je rychlost disipace kinetické energie turbulence, eventuálně měrná rychlost disipace kinetické energie

turbulence. Dvou-rovnicových modelů je ovšem další spousta, nicméně  $K - \varepsilon$  a  $K - \omega$  model dnes mají relativně univerzální využití v inženýrských aplikacích [2] [13].



Obrázek 5: Hierarchie turbulentních modelů dle Blažka [15]

### 3.1.5.1. $K - \varepsilon$ model

V praxi v nejvyšší míře aplikovaným modelem je Launderův a Spaldingův  $k-\varepsilon$  model. Jako z prvních univerzálně použitelných modelů byl podroben důkladnému výzkumu, proto jsou známy jeho výhody ale i slabší stránky [13].

Mezi neznámější a nejpoužívanější modifikace patří RNG a tzv. realizovatelný  $K - \varepsilon$  model. Rozdílem RNG modelu vůči původní rovnici je ten, že jeho rovnice byly odvozeny a konstanty rovnice zahrnující měrnou rychlost disipaci kinetické energie nejsou empirické [2] [13]. Vzhledem k standardnímu modelu  $K - \varepsilon$  rovnice zahrnuje zpřesnění predikce proudění s rychlými deformacemi či rotujícími proudění, některé publikace však nasvědčují, že pro simulace některých konfigurací míchaných reaktorů RNG  $K - \varepsilon$  model je méně vhodný [22].

Realizovatelná modifikace K-e modelu umožňuje lepší predikci proudění s cirkulacemi, odtržením proudu či s rotací [13]. Tyto dvou-rovnicové modely jsou často využívány jak pro účely MRF, tak i pro účely sliding mesh simulací.

### 3.2. Modelování reaktorů za přítomnosti tří fází

Speciálním případem může být modelování míchaných reaktorů za přítomnosti všech tří fází. Výzkum takových případů do posledních let přitahoval obecně méně pozornosti, ovšem v posledním desetiletí se objevilo několik publikací zabírajících se touto problematikou [5] [6] [7] [8] [9]. Simulace takového problému si téměř v každém případě vyžaduje využití časově neustálených metod. Pro získání vlastností proudění v jednotlivých částech objemu se tedy aplikuje na výpočetní techniku náročnější, již v předcházející části práce popisován sliding mesh model.

Při přítomnosti tří fází se pak ještě obvykle sleduje dvou dalších parametrů. Prvním z těchto parametrů je interakce hladiny kapaliny s nad hladinou se nacházejícím plynným prostředím. Dalším zpravidla sledovaným jevem je pohyb inertních částic v tomto systému [7] [8] [10].

Pokud účelem numerické simulace je již zmíněná interakce a získání nesrovnalostí na volném povrchu, je nutno použít vícefázových modelů v kombinaci se sliding mesh modelem. Ve výpočtové mechanice tekutin se v současné době můžou na takové případy aplikovat dva přístupy, Euler-Lagrangeova a Euler-Eulerova metoda [2].

Euler-Lagrangeův přístup vnímá kapalnou fázi jako kontinuum, kterou řeší pomocí Navier-Stokesových rovnic, přičemž v kontinuu rozptylující se fáze je řešena způsobem, že se sleduje veliké množství částic skrz celé pole proudění [2]. Dispergovaná fáze může s kapalným prostředím měnit hybnost, hmotu i energii. Přístup je vhodný, když se může zanedbat interakce jednotlivých částic, a dispergovaná fáze je přítomná pouze v malém objemovém podílu [2]. Trajektorie částic jsou vypočteny jednotlivě v stanovených intervalech během výpočtu kapalně fáze. Tyto vlastnosti však činí tento model nevhodným pro účely simulace volné hladiny vyskytující se v míchaných reaktorech, kde objemový poměr přítomné druhé fáze nelze zanedbat [2] [11]. Další nevýhodou je, že sledováním pohybu vysokého množství částic Euler-Lagrangeův přístup vyžaduje vyšší výpočetní možnosti.

V případě, když se v míchaných reaktorech definuje jako dominantní cílový výstup přibližný pohyb inertních částic, program Ansys Fluent umožňuje zanedbat vzájemné působení kapalně a plynně fáze přidáním okrajové podmínky „simmetry“ [2] [10]. Tento přístup umožňuje využít jednoduššího,

časově ustáleného MRF modelu v kombinaci s vícefázovým Euler-Lagrangeovým modelem. V takovém případě, pro záměr sledování inertních částic může být vhodný Discrete Phase Model [10]. Fluent předpovídá pohyb inertních částic integrací silové rovnováhy na částici. Silová rovnováha na částici může být opsána (ve směru osy x), jako [2]:

$$\frac{du_p}{dt} = F_d(\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (4)$$

Kde  $F_d(\vec{u} - \vec{u}_p)$  je síla vztahování (drag force) na jednotku hmotnosti částice,  $\vec{u}$  je rychlostí kapalné fáze,  $\vec{u}_p$  je rychlostí částice,

$$F_d = \frac{18\mu C_D Re}{\rho_p d_p^2} \quad (5)$$

$\mu$  je dynamická viskozita,  $\rho_p$  je hustota a  $d_p$  je průměr částice.  $Re$  je relativní Reynoldsovo číslo, které je definováno, jako

$$Re = \frac{\rho d_p [\vec{u}_p - \vec{u}]}{\mu} \quad (6)$$

Rovnice 5 zahrnuje  $\vec{F}$  také přídatné síly, které za určitých speciálních okolností můžou mít vliv na celkovou silovou rovnováhu. Jednou takou silou může být tzv. „síla virtuální hmoty“ [2], síla nutná ke zrychlení kapaliny obklopující částici. Sílu lze definovat, jako

$$F = \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{d}{dt} (\vec{u} - \vec{u}_p) \quad (7)$$

Další takou silou je tzv. „síla tlakového gradientu“ [2], určena jako:

$$F = \frac{\rho}{\rho_p} u_p \nabla u \quad (8)$$

Tyto přídatné síly se doporučuje zohlednit ve výpočtu v případě, když se hodnoty hustoty kapaliny a hustoty částice blíží k přibližně stejné hodnotě.

Síla  $\vec{F}$  v rovnici 5 také zahrnuje vliv rotační oblasti definované v MRF modelu na částice přítomné do kapalné fáze. Pro rotaci kolem osy Y se tato síla může definovat, jako [2]:

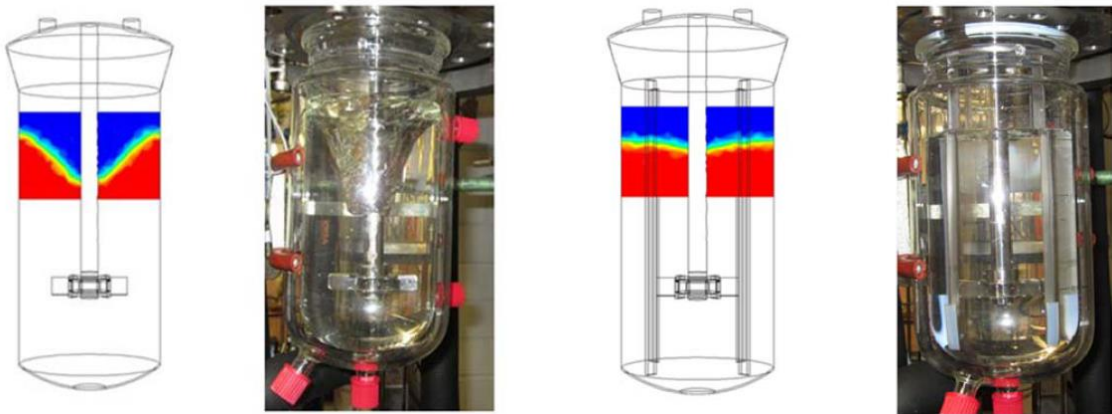
$$\left(1 - \frac{\rho}{\rho_p}\right) \Omega^2 x + 2\Omega \left(u_{p,z} - \frac{\rho}{\rho_p} u_z\right) \quad (9)$$

Kde  $u_{p,z}$  a  $u_z$  jsou rychlosti částic a rychlost kapalného média ve směru Z.

$$\left(1 - \frac{\rho}{\rho_p}\right)\Omega^2 z + 2\Omega\left(u_{p,x} - \frac{\rho}{\rho_p}u_x\right) \quad (10)$$

Kde  $u_{p,x}$  a  $u_x$  jsou rychlosti částic a rychlost kapalného média ve směru X.

Jiným typem přístupu je Euler-Eulerova metoda. Různé fáze jsou považované jako vzájemně interagující kontinua. Euler-Eulerova metoda je preferována pro většinu vícefázových simulací. Program Ansys Fluent obsahuje tři metody založené na Euler-Eulerovém přístupu: volume of fluid (VOF) model, mixture model a Eulerův model [2]. V míchaných reaktorech přítomná hladina, případ rozhraní kapaliny a plynu, je charakteristickým příkladem použití tohoto jednoho z nejvíce využívaných vícefázových metod pro nemísitelné kapaliny – VOF modelu.



Obrázek 6: Simulace pohybu hladiny využitím VOF modelu [16]

Ve VOF modelu se aplikuje jedna sada rovnic hybnosti pro obě fáze, pro kontinuální a také pro dispergovanou, v důsledku toho sdílejí obě fáze společné rychlostní a tlakové pole [2]. Různé fáze se řeší jako fázové objemové podíly, přičemž suma objemových podílů má hodnotu jedna v každé buňce sítě, a jsou spojitě funkce času a polohy [17]. Model byl vytvořen pro nemísitelné kapaliny, kde je značný rozdíl hustot mezi jednotlivými fázemi.

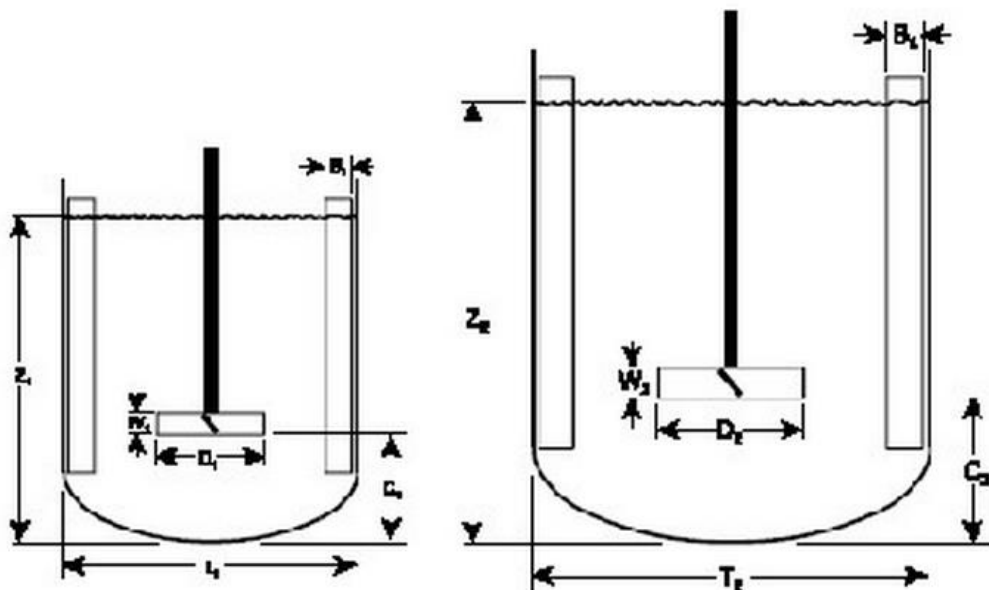
## 4. Metody zvětšování měřítka míchaných nádrží

Hlavním cílem zvětšování měřítka je navrhnout míchací zařízení průmyslových rozměrů, při zachování kvality míchání jako v nádržích menších rozměrů (ve většině případů jde o pokusné škály laboratorních rozměrů). Kritéria zvětšování měřítka závisí ve značné míře na typu procesu probíhajícího v zařízení [11].

### 4.1. Teorie podobnosti

#### Geometrická podobnost

Základní metody zvětšování měřítka se zakládají na geometrické podobnosti míchacích aparátů [3]. Jde zejména o klíčové poměry geometrie, jako poměr průměru míchadla a nádrže ( $D/T$ ), poměr vzdálenosti míchadla od dna nádrže ( $C/T$ ), výška kapaliny vzhledem k průměru nádrže ( $H/T$ ), počet narážek nebo šířka narážek vůči průměru nádrže. Ovšem, v některých případech podobnost geometrických charakteristik není dostačujícím kritériem pro zvětšení měřítka reaktoru [3] [11].



Obrázek 7: Geometrická podobnost míchacích nádrží [20]

#### Podobnost fyzikálních jevů

Fyzikální děje jsou si podobné, jestliže jsou si podobné všechny veličiny charakterizující daný děj. V odpovídajících se bodech dvou systémů a v odpovídajících si okamžicích je veličina vztažená k prvnímu děju, úměrná k veličině vztažené k druhému děju (jejich vzájemný poměr je konstantní), pak jsou si děje navzájem podobné [3]. Poměr veličin se nazývá konstanta podobnosti. Podobnost může být popsána různými veličinami, pro které může



nabývat konstanta podobnosti rozdílné hodnoty, může teda existovat podobnost rychlostních polí, tepelných polí atd. [3]. Při podobnosti komplexnějších dějů postačuje, aby konstanty podobnosti byly vzájemně vázány pro daný děj určitou závislostí [3].

### **Zákony teorie podobnosti [3]**

Zákon první:

Děje vzájemně si podobné mají odpovídající si kritéria podobnosti. První zákon umožňuje určení veličen, které třeba měřit ve fyzikálních pokusech.

Zákon druhý:

Každou vztah mezi proměnnými, jež charakterizuje nějaký děj, lze vyjádřit jako závislost kritérií podobnosti. Ze zákona vyplývá, že výsledky získané experimentálním zkoumáním je třeba zobecnovat v podobě rovnic, jejichž proměnnými jsou kritéria podobnosti. Tímto způsobem se může zjednodušovat zobecnění výsledků měření.

Zákon třetí:

Aby byly děje podobné, musí mít shodná číselné hodnoty určujících kritérií podobnosti a obdobné podmínky jednoznačnosti. Pak lze výsledky měření rozšířit na podobné případy větších měřítek.

Praktické sestavování kritérií podobnosti se zjišťuje pomocí analýzy diferenciálních rovnic popisujících jev probíhající během procesu a příslušných okrajových podmínek, nebo pomocí tzv. rozměrové analýzy [3].

## **4.2. Kritéria podobnosti**

Mezi několik z nejzákladnějších kritérií zvětšování měřítka patří příkon vztažený na jednotku objemu ( $P/V$ ). Pro vyjádření tohoto kritéria musíme v prvním kroku získat příkon míchadla.

Příkonem míchadla se rozumí energie předaná pohybem míchadla do kapalné fáze nacházející se v nádrži [4]. Jedním z obecných vztahů pro určení příkonu míchadla může být definován vztahem [3]:

$$P = P_p \cdot \eta_p \cdot \eta_u \quad (11)$$

Kde  $P$  je příkon míchadla,  $P_p$  je příkon poháněcího motoru.  $\eta_p$  je mechanická účinnost převodů a  $\eta_u$  je mechanická účinnost ucpávky (vztah platí v případě, jsou-li mechanické převody a ucpávka součástí míchacího zařízení). Příkon motoru je obvykle větší než příkon míchadla, z důvodu ztrát energie.

V případě geometricky podobných míchacích zařízení lze vztah pro příkon míchadla definovat využitím rozměrové analýzy i pomocí Eulerova čísla pro míchání, zvané rovněž příkonové číslo [3].

$$Eu_M = C \cdot Re_M^A \cdot Fr_M^B \quad (12)$$

Kde  $Re_M^A$  je modifikované Reynoldsovo číslo pro míchání a  $Fr_M^B$  je modifikované Froudeovo číslo pro míchání. Konkrétní tvar funkce, hodnoty exponentů lze stanovit experimentálně.

V případě znalostí rychlostních vektorů zkoumané míchané vsádky lze příkon míchadla stanovit také integrací silových účinků na plochu míchadla [14]:

$$P = \int_{S_m} \vec{u} \cdot d\vec{F} = \int_{S_m} \vec{u} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \cdot dS \quad (13)$$

Kde  $\vec{u}$  je vektor rychlosti, diferenciální vektor síly  $d\vec{F}$  je dán jako součin tenzoru celkových napětí  $\vec{\sigma}$  a orientované plochy  $\vec{n} \cdot dS$ .

Pro newtonské kapaliny lze odvodit bezrozměrnou rovnici [11]:

$$\frac{P}{\rho N^3 d^5} = \int_{S_m} \vec{u} \cdot \left\{ -p\vec{\delta} + \frac{1}{Re} [\nabla\vec{u} + (\nabla\vec{u})^T] \right\} \cdot \vec{n} \cdot dS \quad (14)$$

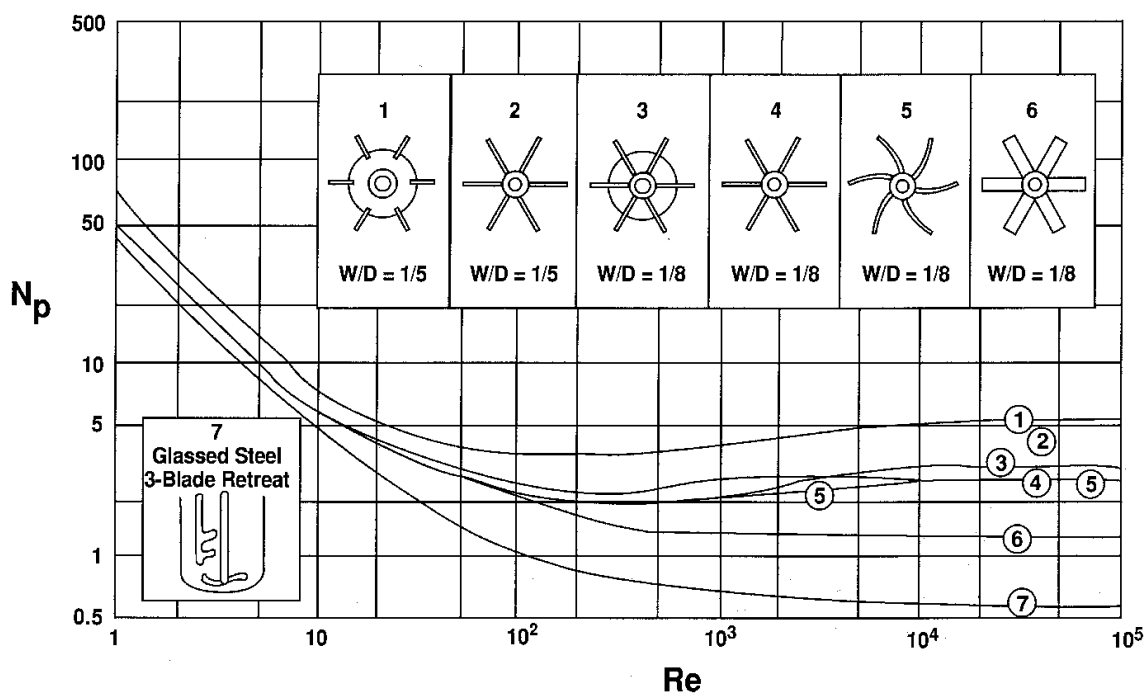
Levá strana rovnice se nazývá příkonové číslo  $P_o$ . Z rovnice kontinuity a Navier – Stokesovy rovnice se odvodilo, že bezrozměrný tlak  $p$  a rychlost  $\vec{u}$  jsou funkcí bezrozměrného času  $t$  a polohy  $\vec{x}$ , Reynoldsova a Froudeho čísla a geometrie zařízení. Z toho pak vyplývá, že příkonové číslo za ustáleného proudění je obecně funkcí Reynoldsova a Froudeho čísla a geometrie zařízení, dána geometrickými simplexmi  $\Gamma_i$  [14]:

$$P_o = f(Re, Fr, \Gamma_i) \quad (15)$$

$P_o$  může být také definované, jako [11]:

$$P_o = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (16)$$

Kde  $N$  jsou otáčky míchadla za sekundy. Příkonové číslo se v literatuře mnohokrát značí rovněž symbolem  $Np$ .



Obrázek 8: Závislost příkonového čísla pro míchadla vyvolávající radiální a axiální proudění [11]

Pro míchadla s rovnými skloněnými lopatkami udávají zdroje hodnotu příkonového čísla  $P_0 = 1,27$  [11], v některých případech  $P_0 = 1,26$  [21].

Když máme k dispozici typ míchadla se širokým využitím v průmyslové praxi, hodnota příkonového čísla se může využít pro stanovení hodnoty příkonu míchadla. Z rovnice (16) se pak definuje příkon míchadla, jako:

$$P = P_0 \rho N^3 D^5 \quad (17)$$

$$P = 2\pi N T_q \quad (18)$$

a  $T_q$  je moment na míchadle.

Po získání hodnoty příkonu, můžeme již určit příkon na jednotku objemu ( $P/V$ ), rovnající se přibližné hodnotě [8] [14]:

$$\cong N_{JD}^3 \cdot D^2 \quad (19)$$

Kde  $N_{JD}$  jsou otáčky nutné ke stažení všech částic pod hladinu,  $D$  je průměr míchadla. Dalším mnohokrát využívaným kritériem je Froudovo číslo [8][11][14]:

$$\cong N_{JD}^2 \cdot D \quad (20)$$

a obvodová rychlost lopatek [8 [11] [14]:

$$\cong N_{JD} \cdot D \quad (21)$$

Další často využívanou rovnicí pro zvětšování měřítka může být také specifický moment [20]:

$$\cong \frac{N_{JD}^2 D^5}{V} \quad (22)$$

Jako je zřejmé, každý z těchto vztahů obsahuje člen rychlosti otáček rotačního míchadla. Pojem otáček nutných ke stažení všech částic pod hladinu je analogií na otáčky vnosu při sedimentace částic. Otáčky nutné ke stažení se určí dle modifikované Zwieteringové rovnice [11] [18].

$$Re_{imp}^{0,1} \cdot Fr^{0,45} \cdot \left(\frac{D}{d_p}\right)^{0,2} X^{0,13} = S \quad (23)$$

Kde  $Re_{imp}$  je Reynoldsovo číslo míchadla, dána vztahem:

$$Re_{imp} = \frac{N_{JD} D^2}{\vartheta} \quad (24)$$

$Fr$  je Froudovo číslo dáno rovnicí:

$$Fr = \frac{\rho_1}{(\rho_s - \rho_l)} \cdot N_{JD}^2 \cdot \frac{D}{g} \quad (25)$$

$D$  je průměr míchadla,  $g$  je konstanta tíhového zrychlení,  $\rho_s$  je hustota částice a  $\rho_l$  je hustota míchané kapaliny a  $\vartheta$  je kinematická viskozita kapaliny. Vztah se dá přepsat do tvaru [11]:

$$N_{JD} = S \vartheta^{0,1} \cdot \left[ \frac{g_c \cdot (\rho_s - \rho_l)}{\rho_1} \right]^{0,45} \cdot X^{0,13} \cdot d_p^{0,2} D^{-0,85} \quad (26)$$

Kde  $X$  je relativní hmotnostní zlomek částic v míchané vsádce a  $S$  je bezrozměrné číslo, které je funkcí typu míchadla, poměru průměru míchadla a nádrže ( $D/T$ ) a ponoření míchadla vzhledem k průměru nádrže,  $d_p$  je průměr částic nacházející se v míchané vsádce.

Ze vztahu vyplývá, že na otáčky nutné ke vztažení částic mají vlastnosti a rozměry částic menší vliv, což je důsledek malých exponentů kinematické viskozity, a také průměru částic. Větší vliv na hodnoty  $N_{JD}$  má rozdíl hustot kapaliny a částice, který se dá pochopit také jako ukazovatel usazovací rychlosti částic. Exponent na průměru míchadla vyjadřuje vliv měřítka [11].

Je však nutno podotknout, že Zwieteringova rovnice ztrácí na přesnosti při hodnotách relativního hmotnostního zlomku pod 2 % a nad hodnotou 15 %, a při vysokých hodnotách průměru částic v kapalném prostředí vůči průměru nádrže  $d_p/T$ . [11].

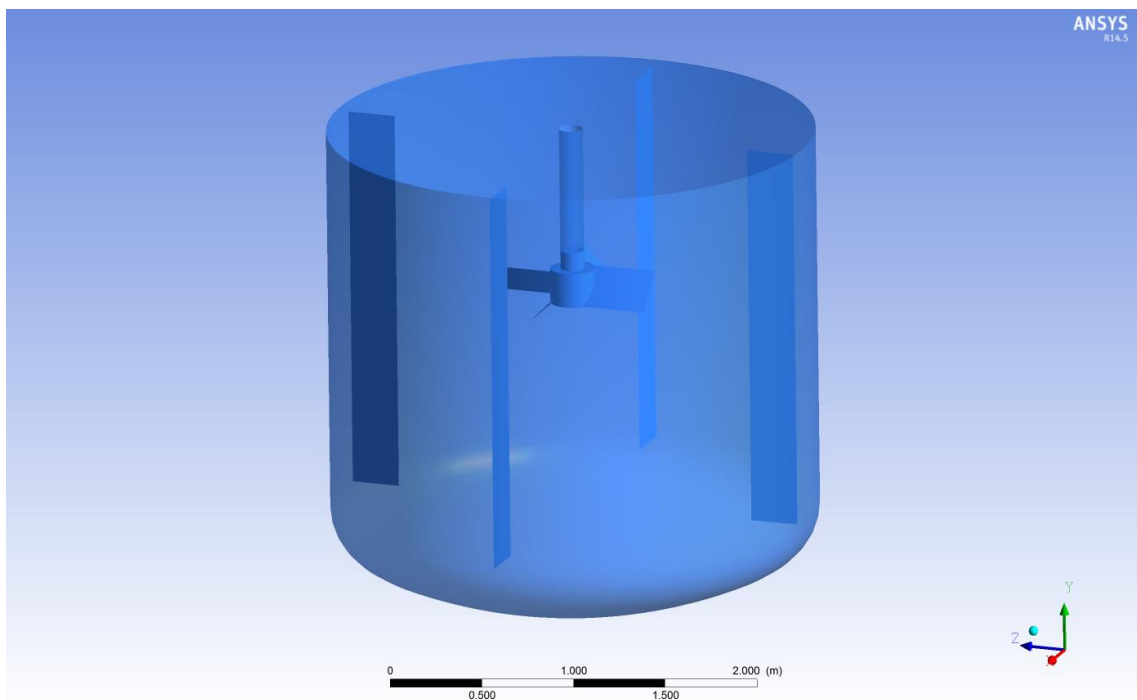
Zwieteringova úvaha říká, že k dosažení otáček nutných ke stažení všech částic pod hladinu došlo v tom případě, když se částice neudrží nad hladinou kapaliny po čas ne delší, než stanovená doba [18]. Obvykle se jako hraniční čas bere hodnota jedné až dvou sekund, v jiných případech dvě až čtyři sekundy. Ovšem spolehlivé stanovení těchto otáček je úkol velice náročný, každý převedený experiment obsahuje značnou míru subjektivity. Určení těchto otáček se v řadě případů provádí jenom způsobem vizuálního pozorování.

## 5. Popis reaktoru

Míchání je možno uskutečňovat na rozsáhlé škále typů zařízení, i mnoha různými způsoby. Na průmyslové úrovni se však v drtivé většině případů vyžaduje dosažení intenzivního míchání. Nejčastějším a nejrozšířenějším způsobem dosažení intenzivního míchání je míchání mechanické. V technické praxi se v míchaných reaktorech realizuje nucený pohyb tekutin formou rotačního mechanického míchání [4].

Klíčové poměry pro charakterizaci geometrie reaktoru jsou poměr průměru oběžního kola a nádrže ( $D/T$ ), výška kapaliny vzhledem k průměru nádrže ( $H/T$ ), vzdálenost míchadla od dna nádrže a šířka narážek k průměru nádrže ( $b/T$ ) [11]. Numerický výpočet byl proveden ve dvou stojatých válcových nádobách s klenutým dnem, které se z hlediska proudění kapalin považují za nejvýhodnější konstrukční řešení [4].

Míchané reaktory o vnitřním průměru  $T=0,61\text{m}$  a  $T=2,67\text{m}$  byly vybaveny 4 narážkami o standardní doporučené šířce  $b=T/10$  [4]. Výška hladiny se rovná průměru nádoby ( $H=T$ ). V reaktoru se nachází míchadlo s rovnými skloněnými lopatkami, průměr míchadla činí třetinu vnitřního průměru míchaného reaktoru ( $T/3$ ) [8]. Míchadla s rovnými skloněnými lopatkami jsou vhodné pro rychloběžné míchání nízkoviskozních kapalin [4]. Pracují v turbulentní oblasti v nádržích s narážkami, jejichž vlastnosti odpovídají našim požadavkům. Míchadlo je ponořeno ve vzdálenosti  $2T/3$  od dna nádoby, čepele turbíny mají sklon 45 stupňů. Klíčové poměry geometrie jsou konstantní pro obě velikosti nádrže.

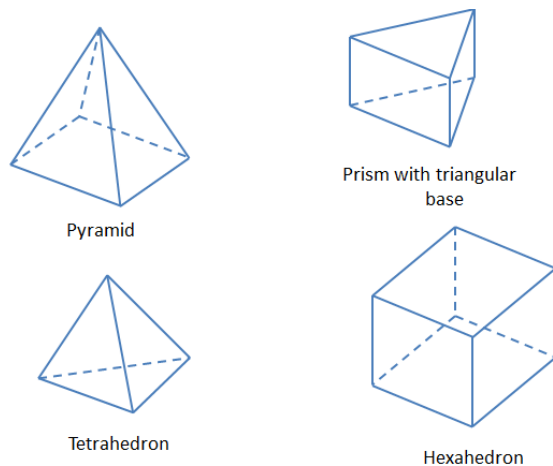


Obrázek 9: Generované zobrazení míchaného reaktoru



## 6. Výpočtová síť

Výchozím krokem k úspěšnému numerickému výpočtu je vhodná prostorová diskretizace (mesh, výpočtová síť) zkoumaného objemu. Hustota výpočtové sítě musí být dostatečně jemná, aby v požadované míře zachytila všechny nutné modifikace charakteristik proudění [2]. Nemůže však být moc jemná, aby omezovala výpočetní možnosti. Nadměru vysoký počet buněk totiž vede k nežádoucímu růstu výpočetního času simulace.



Obrázek 11: Typy buněk prostorové diskretizace [19]

Pro trojrozměrné objemy se může použít diskretizace pomocí buněk formující čtyřstěny (tetrahedra - čtyři stran), hranoly a pyramidy (pět stran) a pomocí sítě tvořené šestistěnnými buňkami (hexahedra). Nejefektivnějším způsobem je výpočetní síť tvořena šestistrannými buňkami (hexhedra mesh) [11]. V případě naší nádrže by dostatečně jemná prostorová diskretizace aplikováním čtyřstěnných buněk vyžadovala přibližně 1 200 000 buněk, přičemž použitím šestistranných buněk pro většinu částí (vytvoření výpočetní sítě si vyžádalo fiktivní rozřezání nádrže) reaktoru se tento počet snížil na 252 820 buněk. Několik sto tisíc buněk je standardní počet pro simulaci nádrží v průmyslovém měřítku [10].

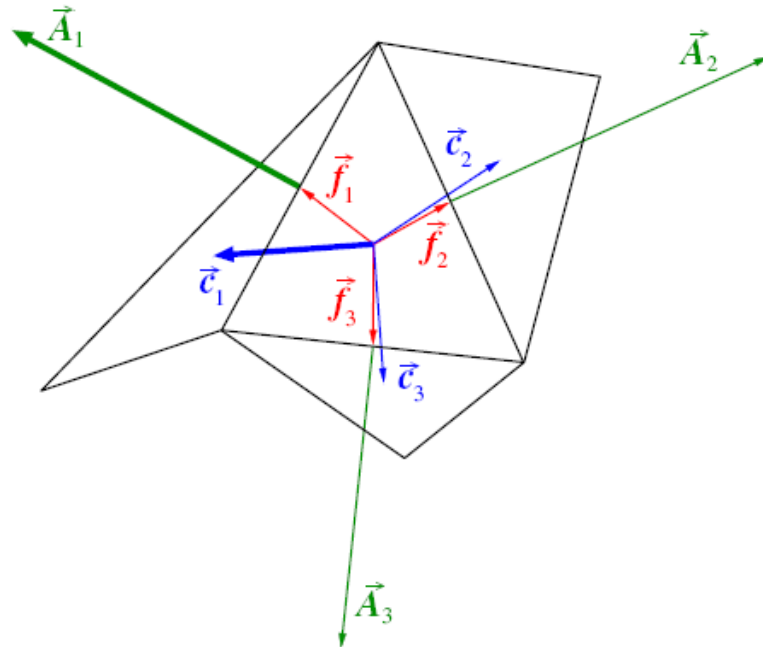
Dalším důležitým aspektem je kvalita prostorové diskretizace. Program Ansys Meshing zahrnuje osm kritérií popisujících její kvalitu. Obecně se nejvíc přihlíží na ortogonální kvalitu a šikmost buněk [2]. Šikmost je jedním z hlavních ukazatelů kvality výpočetní sítě, ukazuje, jak blízko je buňka k ideálu.

Hodnota šikmosti	Kvalita buněk
0-0,25	Vynikající
0,25-0,5	Velmi dobrá
0,5-0,8	Dobrá
0,8-0,94	akceptovatelná
0,95-0,97	Zlá
0,97-1	Neakceptovatelná

Tabulka 2: Hodnoty šikmosti [2]



Ortogonální kvalita se počítá pomocí normálového vektoru ploch buňky, vektorů z těžiště buněk směřující k těžišti sousedících buněk a vektoru směřujícího z těžiště buňky k plochám buňky. Rozsah hodnot ortogonální kvality je mezi 0 až jedna, kde hodnota 0 udává nejnižší kvalitu buňky [2].



Obrázek 12 Vektory nutné pro výpočet ortogonální kvality [2]

$$\frac{\vec{A}_i \cdot \vec{f}_i}{[\vec{A}_i][\vec{f}_i]} \quad (27)$$

Kde  $\vec{A}_i$  je normálovým vektorem plochy a  $\vec{f}_i$  je vektorem ze středu buňky ke středu plochy.

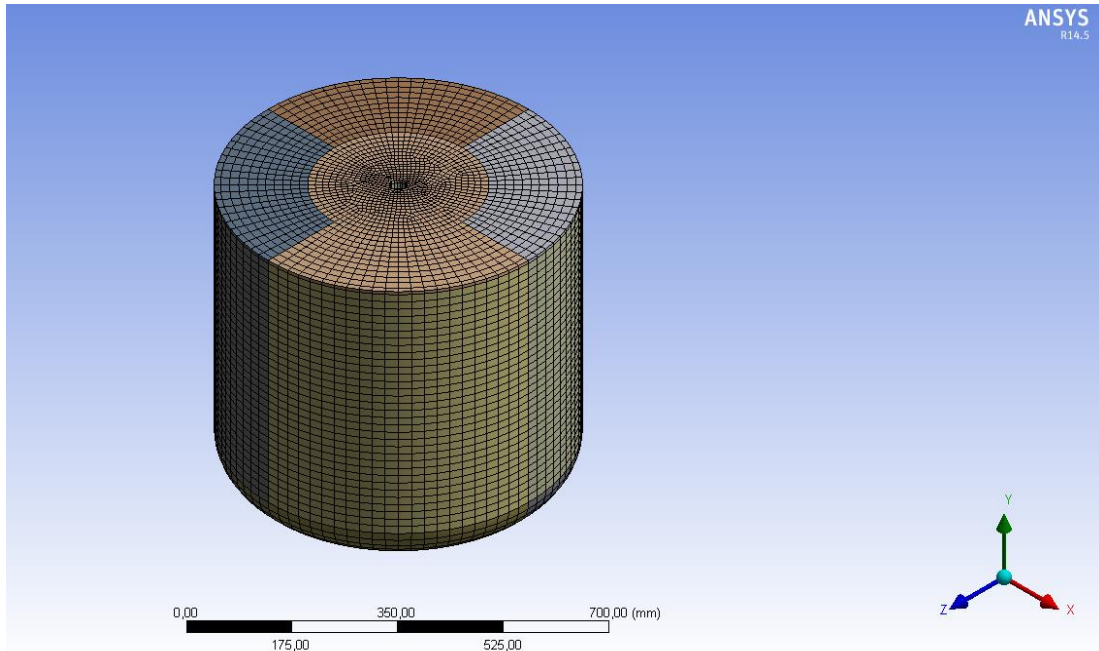
$$\frac{\vec{A}_i \cdot \vec{c}_i}{[\vec{A}_i][\vec{c}_i]} \quad (28)$$

Kde  $\vec{c}_i$  je vektor ze středu buňky směřující do středu sousední buňky. Hodnotu ortogonální kvality udává minimální hodnota určena výše opsanou dvojicí rovnic [2].

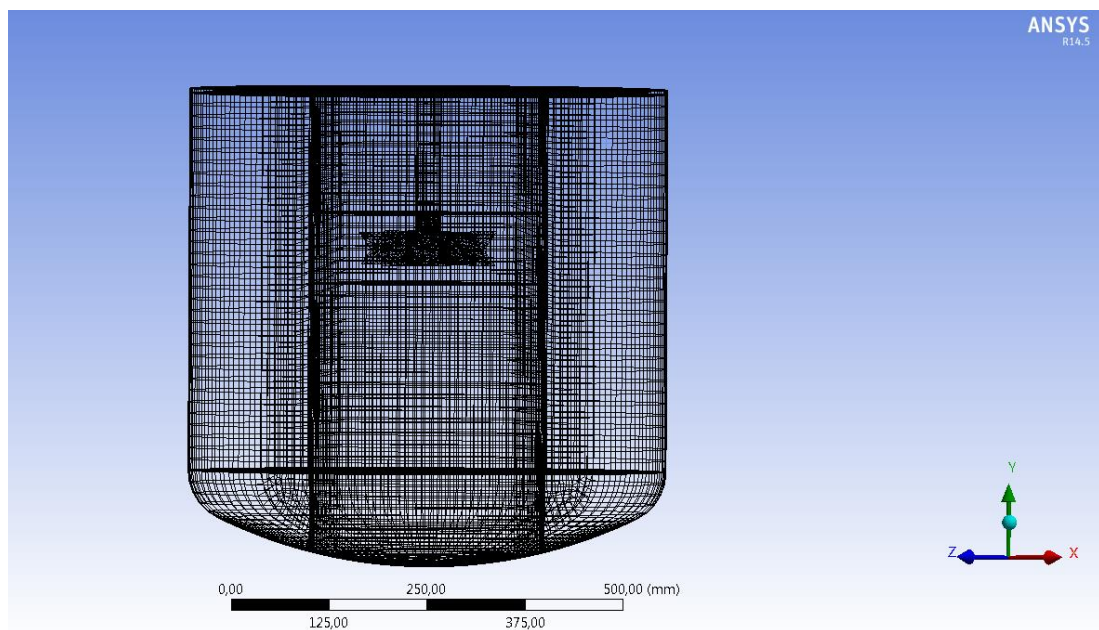
Hodnota ortogonální kvality	Kvalita buněk
0,95-1	Vynikající
0,70-0,95	Velmi dobrá
0,20-0,69	Dobrá
0,15-0,19	akceptovatelná
0,001-0,14	Zlá
0-0,001	Neakceptovatelná

Tabulka 3: Hodnoty ortogonální kvality [2]

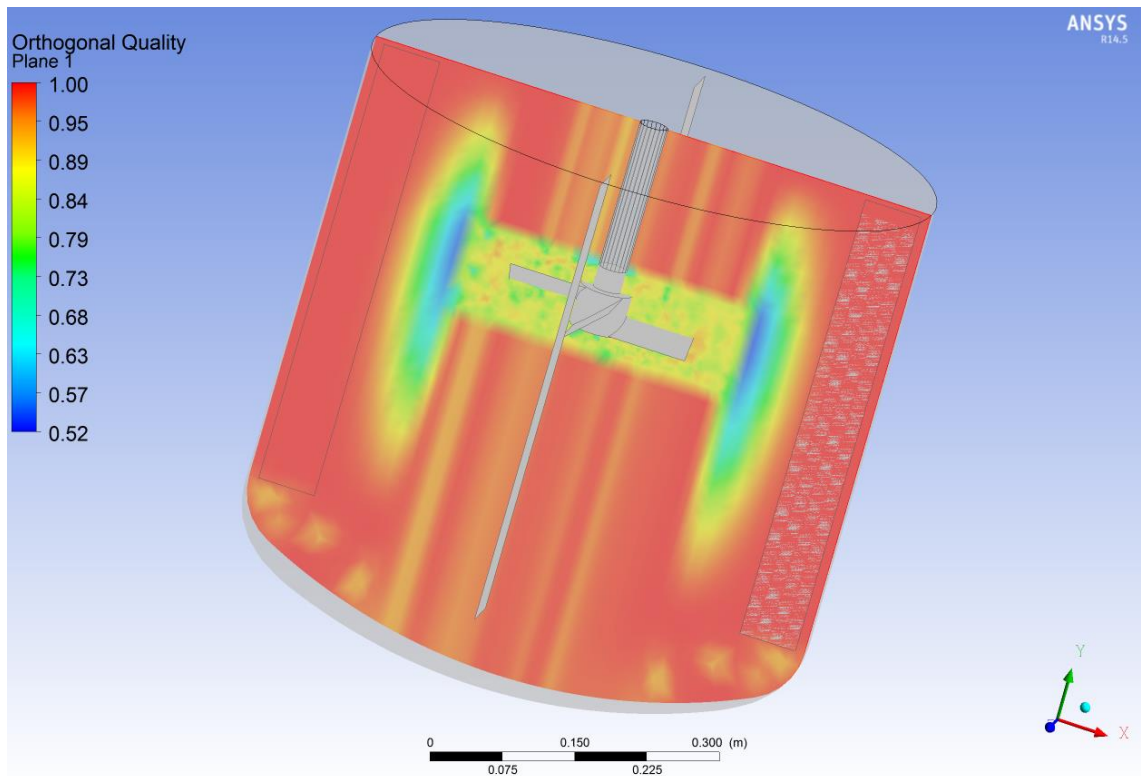
Doporučená hodnota ortogonální kvality by měla být vyšší, než 0,1 a nejvyšší šikmost by se měla držet pod hodnotou 0,95 [2]. V našem případě je nejnižší hodnota ortogonální kvality výpočetní sítě reaktoru 0,253 nad požadovaným minimem 0,1. Nejvyšší hodnota šikmosti 0,895 rovněž nedosahuje doporučené hraniční hodnoty 0,95.



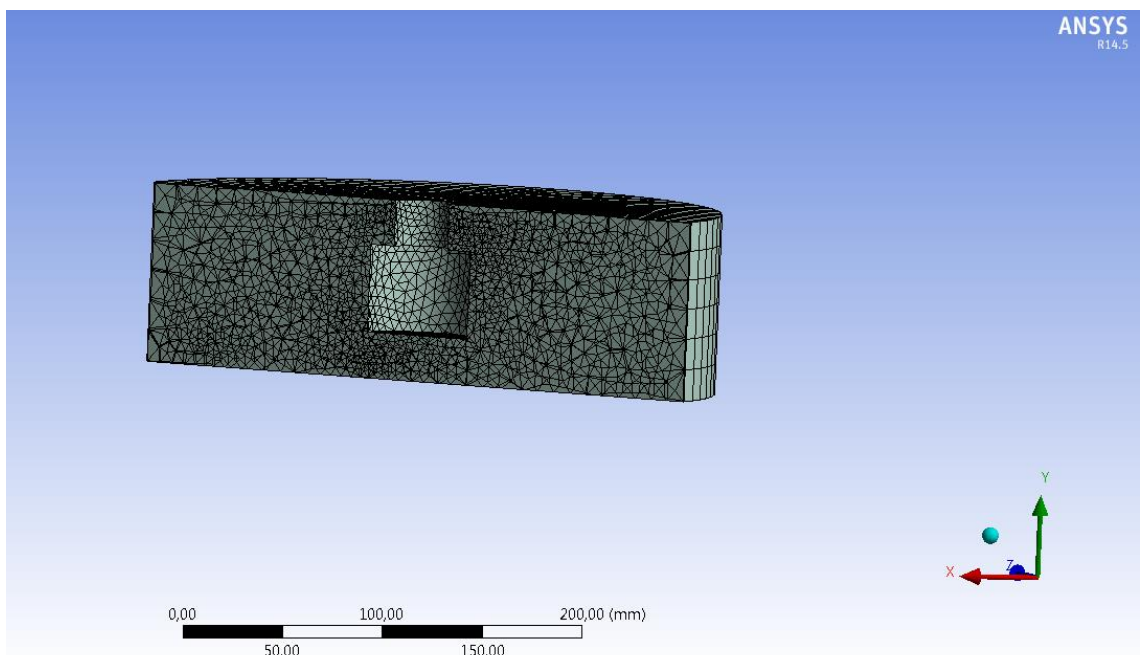
Obrázek 13: Nestrukturovaná prostorová diskretizace reaktoru. Většina sítě byla vytvořena hexahedra buňkami.



Obrázek 14: Kontury fiktivní rozřezání nádrže pro účely vytvoření kvalitní prostorové diskretizace.



Obrázek 15: Hodnoty ortogonální kvality reaktoru v řezu plochou XY



Obrázek 16: Vnitřní rotační oblast reaktoru, jediná zóna nádrže, která se síťovala s využitím tetrahedra buněk.

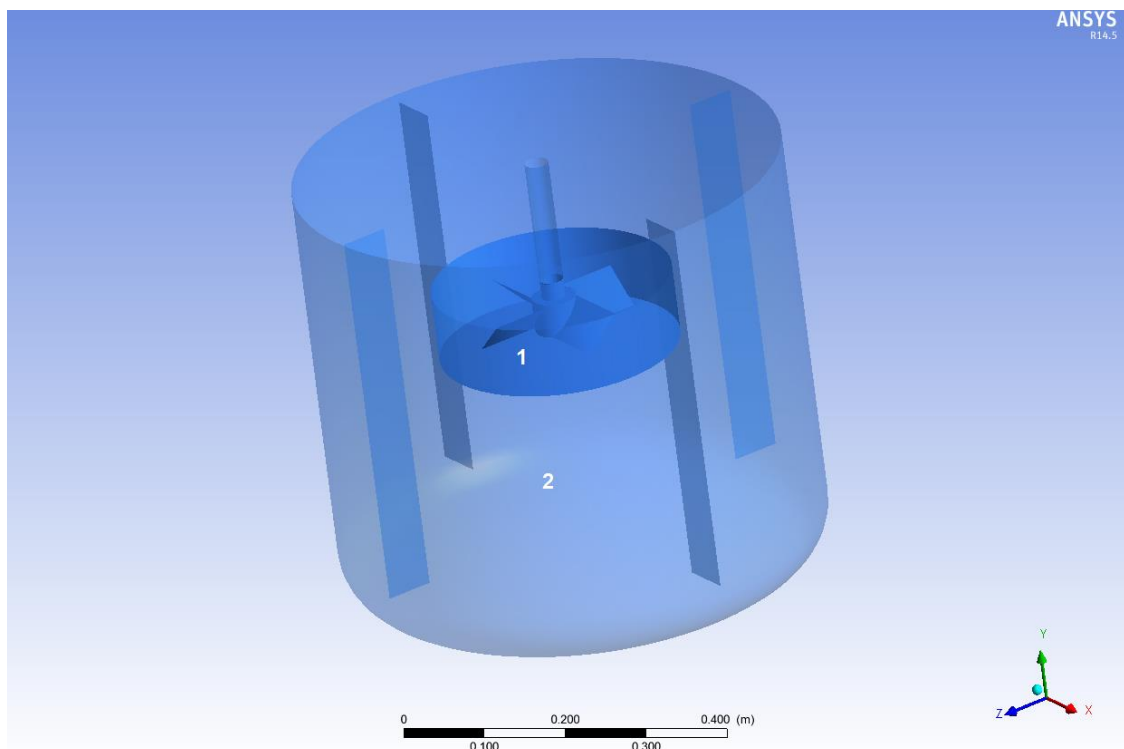
## 7. Příprava výpočtu

Před samotným výpočtem se zkontroluje myšlenkový pochod simulace. V případě míchání se ověří předpokládaná přítomnost turbulentního proudění.

### 7.1. Souhrn výpočetních metod

Cílem numerické simulace bylo získání průtokových parametrů ve dvou míchacích reaktorech různých velikostí. Klíčové geometrické poměry byly ponechány pro obě nádrže. Podobnost reaktorů byla ponechána z důvodu, že výstupy jednotlivých fyzikálních parametrů CFD simulace mají být použité pro zhodnocení možností využití dat pro účely zvětšování měřítka (scale-up) reaktorů. Vzhledem k tomu, že experimenty ve většině případů nelze provádět v zařízených průmyslových rozměrech, je zvětšování měřítka jedním z důležitých kritérií při návrhu míchacích aparátů.

Pro získání průtokových parametrů se využilo časově ustáleného MRF modelu. Objem míchaných reaktorů byl rozdělen do dvou částí. Vnitřní, rotační část menších rozměrů obsahovala míchadlo s rovnými skloněnými lopatkami a kapalně médium obklopující toto míchadlo. Vnější oblast obsahovala zbývající část kapaliny, v této oblasti se nacházely i narážky a větší část hřídele míchadla. Jiné vestavby v míchaném reaktoru nebyly použité.



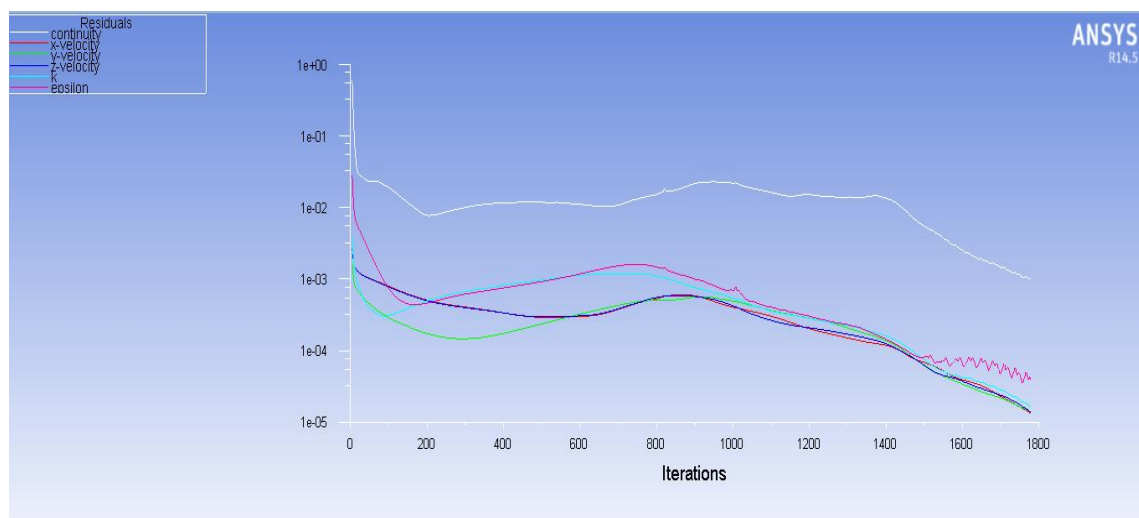
Obrázek 17: Rozdělení reaktoru pro potřeby MRF výpočtu.

Pro účely první fáze výpočtu byly použité okrajové podmínky „wall“ a „simmetry“. Přidáním okrajové podmínky „simmetry“ jsme zanedbaly interakce volné hladiny se vzduchem nacházejícím se nad hladinou. Okrajová podmínka „wall“ byla využita pro čtyři narážky rozmístěné po okraji nádoby a pro míchadlo s rovnými skloněnými lopatkami. Jiné okrajové podmínky pro první fázi výpočtu, simulace proudění pomocí MRF modelu nebyly použité.

Pro účely zachycení účinků turbulence se během simulace MRF modelem využilo dvou-rovnicového  $K - \varepsilon$  modelu turbulence.  $K - \varepsilon$  model byl vybrán zejména z důvodu jeho prozkoumanosti a robustnosti, a také proto, že model byl již mnohokrát využíván pro simulaci podobného ražení.

Pro účely časově ustálené simulace se ve většině případů využívá algoritmu SIMPLE nebo algoritmu SIMPLEC. Pro naši simulaci jsem použil algoritmus SIMPLE.

Model byl odzkoušen poprvé na diskretizaci prvního řádu, pak i s diskretizací druhého řádu. Konvergence se dosáhlo i s diskretizací druhého řádu, toto nastavení bylo ponecháno i pro účely finální simulace. Pro všechny rovnice se použila diskretizace druhého řádu, pro rovnici momentu, rovnici turbulentní kinetické energie a taky pro rovnice rychlosti disipace kinetické energie turbulence.

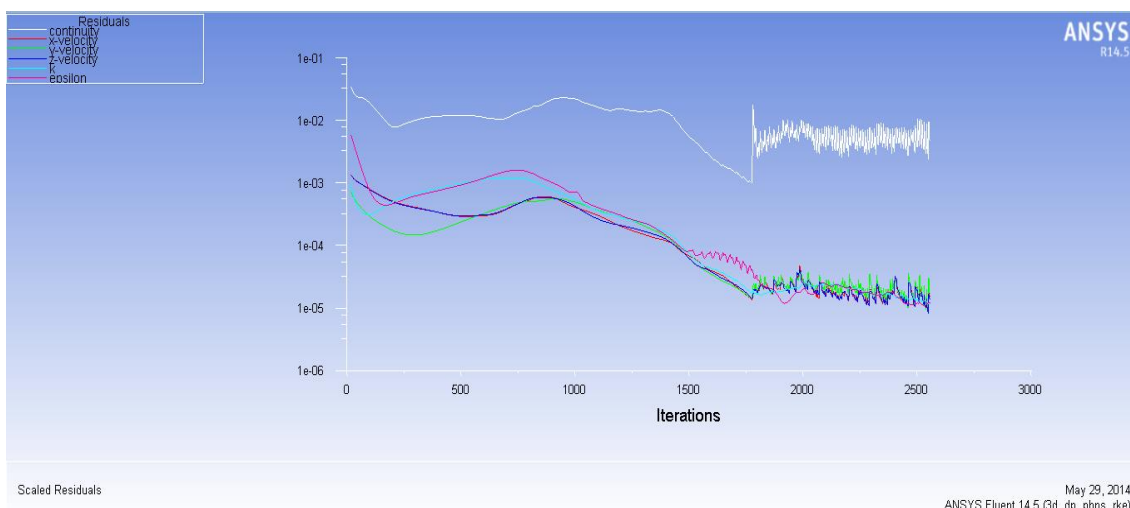


Obrázek 18: Residua simulace bez přítomnosti inertních částic, T=0,61m

Po konvergenci simulace MRF modelu se do výpočtu přidal Discrete Phase Model (DPM). DPM model byl přidán pro sledování pohybu inertních částic. Relativní hmotnostní zlomek inertních částic byl 1 procento pro reaktor menšího rozměru a 0,5 procenta pro reaktor větších rozměrů. Pro určení rychlosti nutné ke vztáhnutí částic a k tomu potřebného času vztahování se do modelu přidala nová okrajová podmínka „porous jump“ s nastavením „escape“. Tímto způsobem se vytvořil tenký film na povrchu kapaliny. Čas nutný ke vztáhnutí z povrchu byl uvažován, jako průměrný čas, kým se jednotlivé částice dostali ze vstupné plochy k ploše „escape“.

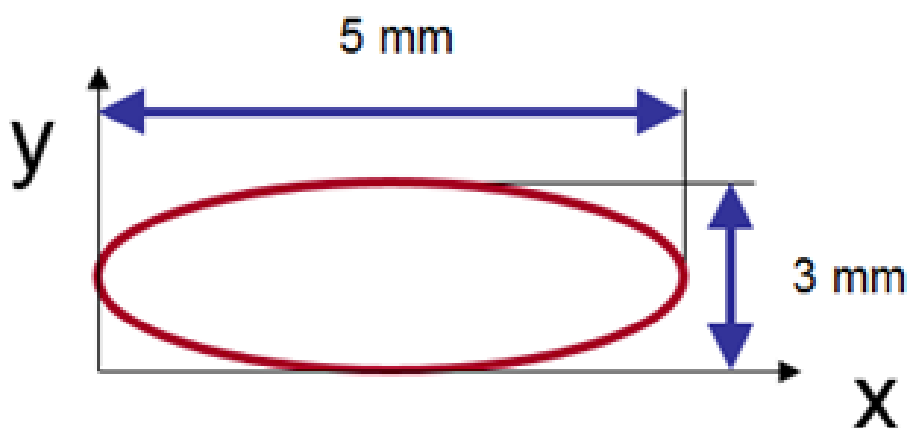
Jako inertní částice se použily částice polyetylénu o hustotě  $904 \text{ kg/m}^3$ . Z důvodu možnosti porovnání dat simulace s experimentem Özcane-Taskina [8] se použily částice stejného typu, publikace však nspecifikuje jejich podrobné geometrické vlastnosti.

Částice oválného tvaru jsou o rozměru  $5 \times 3 \times 2 \text{ mm}$ . Program Ansys Fluent však pro účely DPM modelu potřebuje definovat částici jako průměr koule. Proto jednou menší dílčí úlohou nutné ke zvládnutí simulace bylo získat tento rozměr vhodným nahrazením tvaru částice.



Obrázek 19: Residua simulace za přítomnosti inertních částic,  $T=0,61\text{m}$

Pro tvarové nahrazení oválné částice se použila elipsa, rozměry  $5 \times 3 \times 2 \text{ mm}$  se uvažovali jako rozměry partikulární částice. Druhým nejdelším rozměrem je šířka  $3 \text{ mm}$  a třetím nejdelším rozměrem je tloušťka  $2 \text{ mm}$ .



Obrázek 20: Rozměry inertních částic

V prvním kroku se určil obsah plochy ohraničené elipsou.

$$S_{el} = \pi \cdot a \cdot b \quad (29)$$

Kde  $a = \frac{5}{2} \text{ mm}$  je délka hlavní poloosy,  $b = \frac{3}{2} \text{ mm}$  je délka vedlejší poloosy.

$$S_{el} = \pi \cdot \frac{5}{2} \cdot \frac{3}{2} = \frac{15}{4} \pi$$

Přidáním třetího rozměru – tloušťky – se získal objem částice jakoby drobného elipsoidního válce.

$$V_{el} = \frac{15}{4} \pi \cdot 2 = \frac{15}{2} \pi$$

Částice se nehradí koulí ekvivalentního objemu:

$$V_{el} = \frac{15}{2} \pi = \frac{4}{3} \pi r^3 \quad (30)$$

Ze vztahu (30) se určí průměr koule, který se aplikuje během simulace DPM modelu:

$$r_k = \sqrt[3]{\frac{45}{8} \pi} = 1,778445 \text{ mm}$$

$$d_p = r_k \cdot 2 = 3,55689 \text{ mm}$$

Kde je  $r_k$  poloměr a  $d_p$  průměr koule ekvivalentního objemu, tj. průměr částice použitý pro cíle simulace v programu Ansys Fluent.

## 7.2. Kontrola předpokladu turbulence

Z mnoha bezrozměrných čísel charakterizujících tok kapalin je jedním z nejčastěji používaných Reynoldsovo kritérium, popisující poměr setrvačných sil a sil molekulárního tření, které je určujícím kritériem pro stanovení druhu toku míchané vsádky. Pro jednoduché proudění v trubkách se Reynoldsovo kritérium definuje:

$$Re = \frac{v D_h^2 \rho}{\mu} \quad (31)$$

Kde  $v$  je rychlost proudění kapalného média,  $D_h$  je charakteristický rozměr trubky,  $\rho$  je hustota a  $\mu$  je dynamická viskozita kapalného média. Pro míchané reaktory lze rovnici definovat, jako [3] [11]:

$$Re = \frac{N D^2 \rho}{\mu} \quad (32)$$

Kde rychlost proudění kapalného média se vymění otáčkami míchadla za sekundu, přičemž  $D$  bude průměr míchadla. Obecně známé hodnoty

Reynoldsova čísla pro plně rozvinuté turbulentní proudění v trubce se pohybují nad hodnotou 10 000, proudění se považuje přechodové při hodnotách mezi 2000 až 4000. Pro případ míchaných reaktorů je přechodová oblast, kde proudění ještě není turbulentní, širší než v případě proudění kapaliny v jednoduchých trubkách. Hodnoty Reynoldsova čísla přechodového režimu proudění leží v mezích 50 až 10 000 v závislosti na geometrii míchané nádrže [3]. Z toho důvodu nelze takto definované Reynoldsovo číslo pokládat za univerzální kritérium určující druh proudění, totiž v rovnici se nepřihlíží ke geometrii nádoby [3]. V našem případě tedy nelze důvěryhodně stanovit přechod od laminárního režimu k režimu turbulentnímu klasickým Reynoldsovým pokusem, výpočet však může posloužit přibližnému odhadu chování proudění. Při dostatečně vysokých hodnotách Reynoldsova čísla může kritériální rovnice prokázat předpoklad turbulence a tím potvrdit zahrnutí turbulentních modelů v numerické simulaci [11].

Strek [3] udává i další možnou formulaci Reynoldsova kritéria:

$$Re = \frac{N_e D^2 \rho}{\mu} \quad (33)$$

Kde  $N_e$  je účinná frekvence otáčení míchadla, dána vztahem:

$$N_e = kN \quad (34)$$

Rychlost otáčení míchadla se koriguje přepočítávacím faktorem. Přepočítávací faktor je různý pro různé typy míchadel, je vypočtený z podmínky rovnosti krouticích momentů míchadla a míchadla standardního [3]. Jako standardní míchadlo se zvolilo lopatkové míchadlo s dvěma kolmými lopatkami, pro tuto konfiguraci je hodnota  $k=1$ . Pro různé typy míchadel se stanovili hodnoty přepočítávacího faktoru mezi 0,59 až 1,34 [3]. Nejvyšší hodnota platí pro turbínové míchadlo se šesti rovnými kolmými lopatkami a s dělicím kotoučem, nejnižší hodnota 0,59 platí pro míchadlo se čtyřmi lopatkami skloněnými pod úhlem  $45^\circ$  [3].

V našem případě se opakoval kontrolní výpočet ve dvou případech. Pro simulaci menšího reaktoru se provedl s nejmenší zvolenou kontrolní rychlostí 120 rpm, stejným způsobem pro simulaci s nejmenší kontrolní rychlostí 60 rpm pro reaktor větších rozměrů.

- stanovení nejmenšího Reynoldsova čísla pro simulaci malého ( $T=0,61$ ) reaktoru

$$Re = \frac{ND^2 \rho}{\mu} = \frac{0,59 \cdot 2 \cdot (0,203)^2 \cdot 998,2}{0,001003} = 48\,394 [-]$$

V malém reaktoru vychází hodnota Reynoldsova bezrozměrného kritéria vysoce nad hraniční hodnoty přechodového režimu proudění, předpoklad turbulentního proudění byl splněn.



- stanovení nejmenšího Reynoldsova čísla pro simulaci většího (T=2,67m) reaktoru

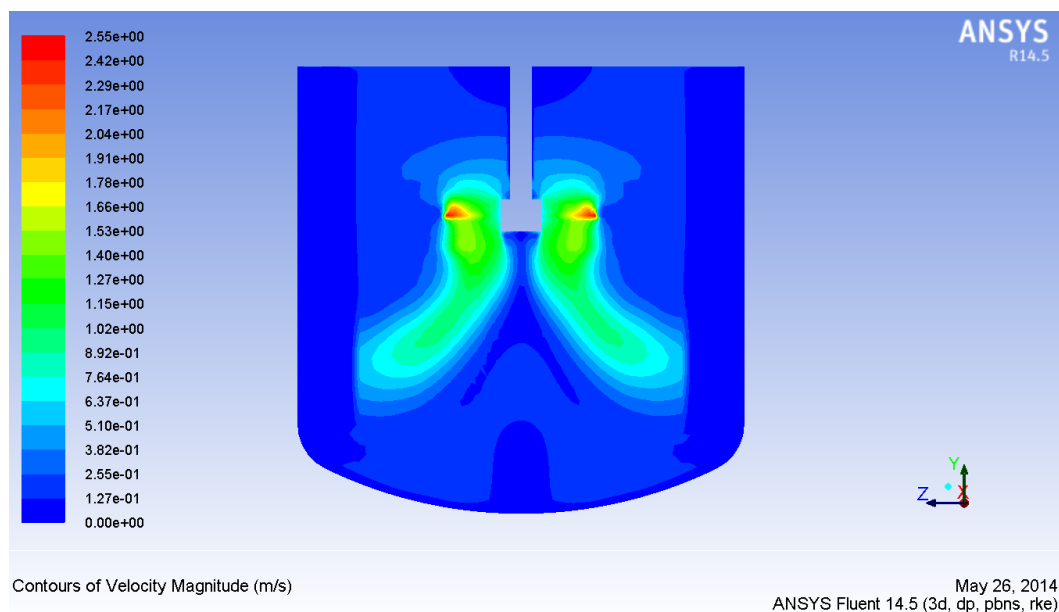
$$Re = \frac{ND^2\rho}{\mu} = \frac{0,59 \cdot 1 \cdot (0,913)^2 \cdot 998,2}{0.001003} = 829579,8 [-]$$

Ve velkém reaktoru vychází hodnota Reynoldsova kritéria vysoce nad hraniční hodnoty přechodového režimu proudění, předpoklad turbulentního proudění byl splněn.

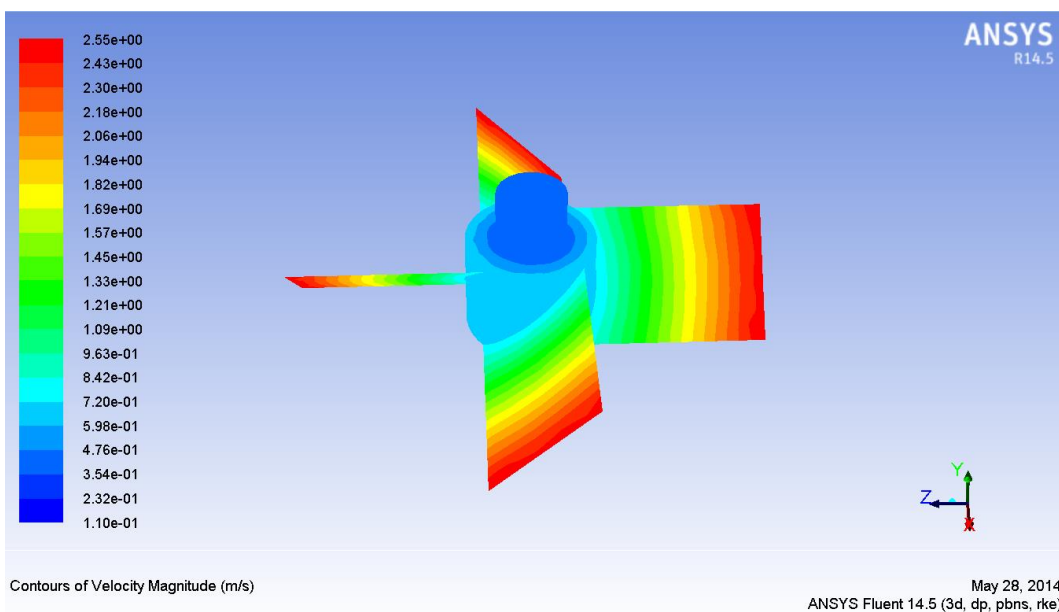
## 8. Výstupy simulace

### 8.1. Reaktor T=0,67m

CFD simulace se provedla na škále různých rychlostí. Jako nejnižší rychlost výpočtu menšího reaktoru byla zvolena hodnota 120 rpm, která se navyšovala v krocích po 30 rpm, při přiblížení ke stržení všech částic po krocích 5 rpm. Z výstupu numerické simulace je zřejmé, že hodnota otáček nutných ke stržení všech částic pod hladinu se ustálila na hodnotě 240 rpm. Výsledky dobře korelují s experimentem Ozcan-Taskina [8], s chybou přibližně 10-15 procent. Největší rychlost pohybu kapaliny se dá zpozorovat v blízkosti konci lopatek míchadla, která má hodnotu  $2,55 \text{ m/s}$ . Rychlostní pole reaktoru je znázorněno na obrázku 21, rychlost na lopatkách míchadla na obrázku 22.

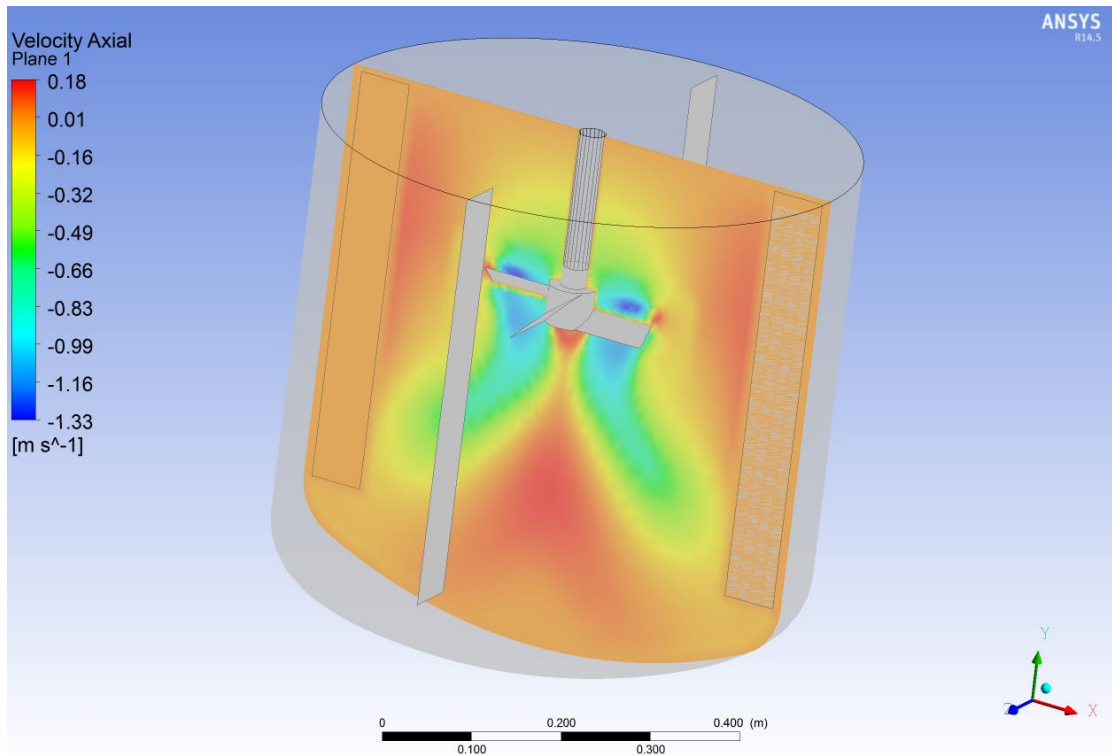


Obrázek 21: Rychlostní pole menšího reaktoru



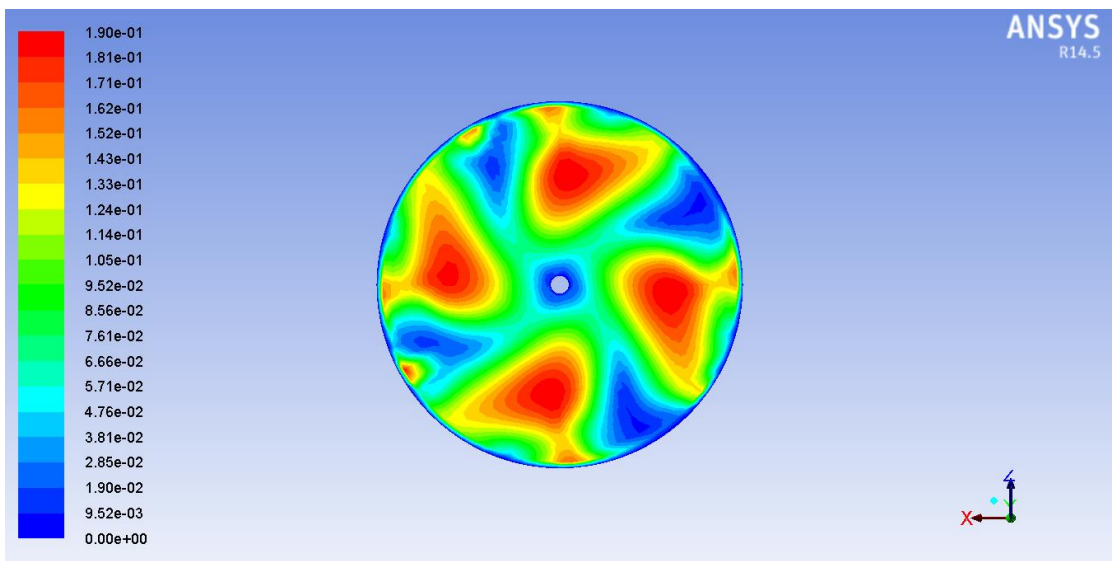
Obrázek 22: Rychlost na lopatkách míchadla

Rychlost proudění se snižuje směrem ke středu míchadla, kde se přibližuje k nulové hodnotě.



Obrázek 23: Axiální složka rychlosti

Rychlostní pole získané určené CFD simulace ukazuje rovněž na nezanedbatelný vliv axiální složky proudění. Při axiálním charakteru míchadla s rovnými skloněnými lopatkami se předpokládá, že dominantním mechanismem stahování plovoucích částic v nádrži je stahování turbulentním pohlcením neboli „vlastním ztržením“.

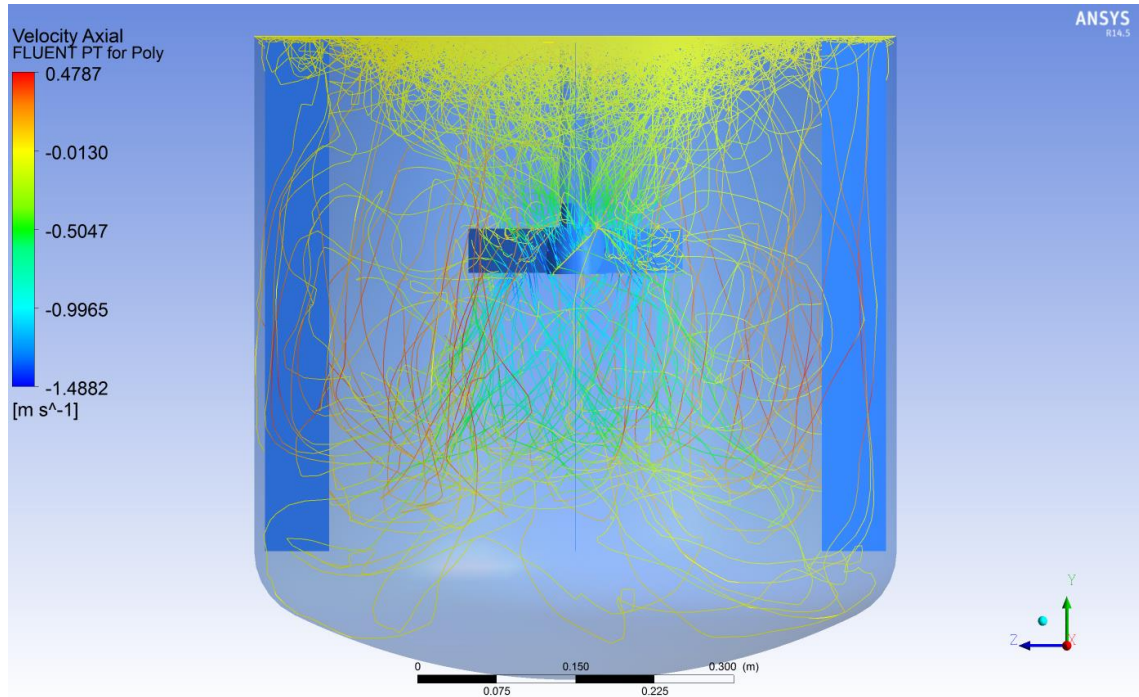


Contours of Velocity Magnitude (m/s)

May 27, 2014  
ANSYS Fluent 14.5 (3d, dp, pbns, rke)

Obrázek 24: Profil rychlosti na hladině kapaliny

Síla působící na částici je funkcí rychlosti „kluzné“ rychlosti mezi pevnou a kapalnou fází. Tato rychlost závisí zejména na rychlosti kapalně fáze, z čeho pak vyplývá, že stahování turbulentním pohlcením závisí také zejména na průměrné rychlosti kapalně fáze [10] [11]. Z toho pohledu je nejdůležitější vliv rychlosti na hladině kapaliny, znázorněné na obrázku 24. Proud kapaliny na hladině se pohybuje směrem od stěn reaktoru k jejímu středu.



Obrázek 25 Axiální složka rychlosti při stahování částic

Z axiální složky rychlosti znázorněné na obrázku 25 lze predikovat pohyb inertních částic v kapalně fázi. Simulace potvrzuje starší zjištění [7] [9], proud od lopatek míchadla přepravuje částice směrem ke dnu nádrže, poté se otáčí směrem k hladině, pak se částice z důvodu působení recirkulačních smyček opětovně vrací do objemu kapaliny.

### 8.1.1. Příkonové charakteristiky míchadla

Příkon míchadla se vyjádří pomocí momentu na lopatkách míchadla rychlosti otáčení míchadla. Rychlost otáčení míchadla bude v našem případě rovná s rychlostí otáčení nutné ke stržení částic:

$$N_{JD} = 240 \text{ rpm} = 4 \text{ s}^{-1}$$

Moment působící na lopatky míchadla se určí programem Fluent pomocí celkového vektoru hybnosti, který se stanoví vektorovým součinem vektorů tlaku a viskózních sil s vektorem momentu:

$$T_q = 1,13 \text{ Nm}$$

Příkon míchadla při stáhnutí částic se určí dle rovnice (18), jako:

$$P_{JD} = 2\pi NT_q = 2 \cdot \pi \cdot 4 \cdot 1,13 = 28,4 \text{ W}$$

$$V = 0,16567697 \text{ m}^3$$

$$\frac{P_{JD}}{V} = \frac{28,4}{0,1656797} = 171,41 \text{ W/m}^3$$

Příkon se pak může využít po odhad bezrozměrného příkonového čísla pomocí rovnice (16):

$$P_o = \frac{P}{\rho N^3 D^5} = \frac{28,4}{998,2 \cdot (4)^3 \cdot (0,203)^5} = \frac{28,4}{22,01866} = 1,28 [-]$$

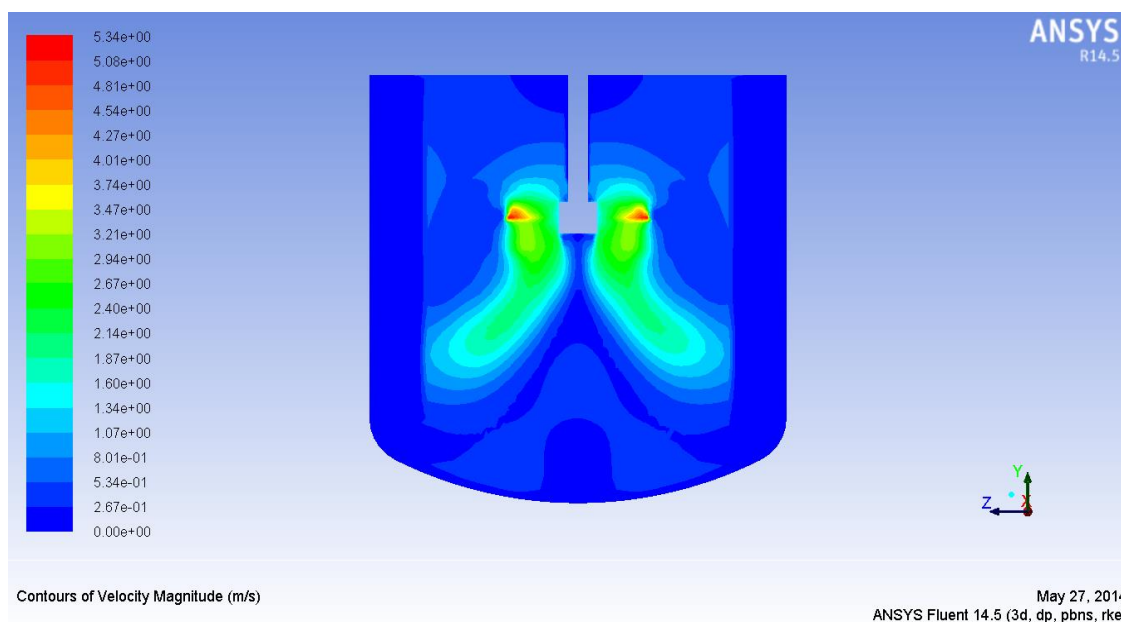
Určena hodnota příkonového čísla téměř celkem odpovídá příkonovým číslem podobných konstrukcí míchadel a také přibližným teoretickým hodnotám určených literaturou [3] [11] [15].

Z výsledků CFD simulace vyplývá, že při vyšších rychlostech otáčení míchadla se poměr částic ztržených pod povrch kapaliny zvyšuje zhruba lineárně se zvyšováním rychlosti otáčení. Závislost již byla upozorovaná také při experimentálním zkoušení, Waghmare [10] konstatuje, že závislost neovlivňují rozměry a ani konstrukční konfigurace nádrže.

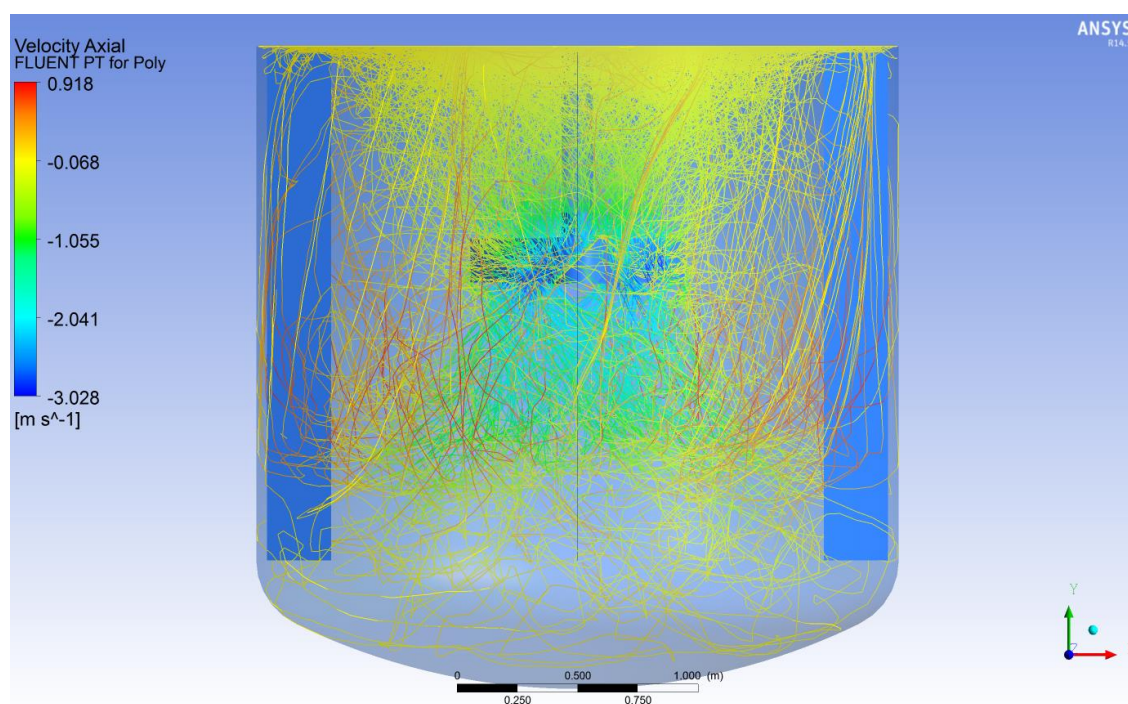
## 8.2. Reaktor T=2,67 m

V případě simulace reaktoru větších rozměrů se postupovalo obdobným způsobem. Jako nejnižší rychlost simulace byla zvolena hodnota 60 rpm, ovšem krok navyšování byl oproti malému reaktoru menší, rychlost otáček míchadla se navyšovala po deseti otáčkách za minutu. Jako hodnota otáček nutných ke stržení všech částic pod hladinu byla určena rychlost otáčení na úrovni 115 rpm. Obdobně jako v případě malého reaktoru, výstupy simulace korelují s experimentálními daty získaných pokusem Özcane-Taskina. Určená rychlost otáčení míchadla nutná ke stržení všech částic je rozmezí 10-15 procentní odchylky vzhledem k experimentálním údajům [8]. Nejvyšší rychlost proudění kapaliny je 5,34 m/s, jako v případě malého reaktoru při konci lopatek míchadla, rychlostní pole reaktoru je znázorněno na obrázku 26.

S více turbulentním prouděním nacházejícím se v reaktorech větších rozměrů je vyšší i rychlost proudění na povrchu kapaliny. Menší rozdíl se dá postřehnout při zkoumání profilů vztahování částic pod hladinu kapaliny. Charakter stahování je jiný, turbulentní vír kolem hřídele míchadla o něco více ovlivňuje stahování než, v malém reaktoru. Proudění kapaliny je intenzivnější, v rychlém sledu stáhne částice pod povrch kapaliny, část z nich se však silným působením recirkulačních smyček vrací na hladinu, a poté znova putují do objemu kapaliny.

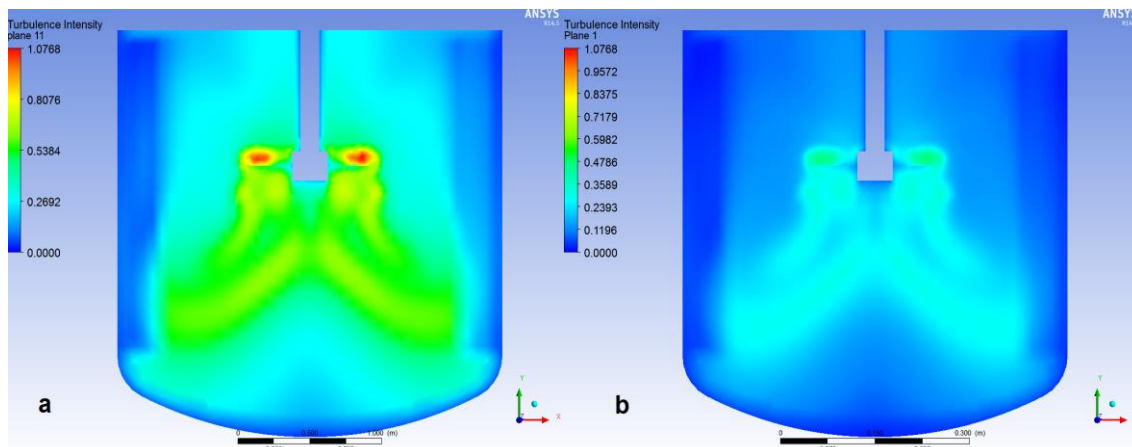


Obrázek 26: Rychlostní pole většího reaktoru



Obrázek 27: Pohyb částic v kapalině

Kromě hlavní smyčky jsou v horní části reaktoru přítomné další menší recirkulační smyčky. Rozdíl v způsobu stahování může být způsoben o mnohem větší intenzitou turbulence ve větším reaktoru, turbulence ve velkém reaktoru má výraznější vliv v blízkosti hladiny reaktoru a také ve významnější oblasti obklopující osu hřídele. Z profilu rychlosti na hladině je však z hlediska stahování částic zřejmé vytvoření jakýchsi mrtvých zón. Rozdíl turbulence je znázorněn na obrázku 28, obě nádrže jsou zobrazeny s mřížkou se stejnou rozpětí hodnot.

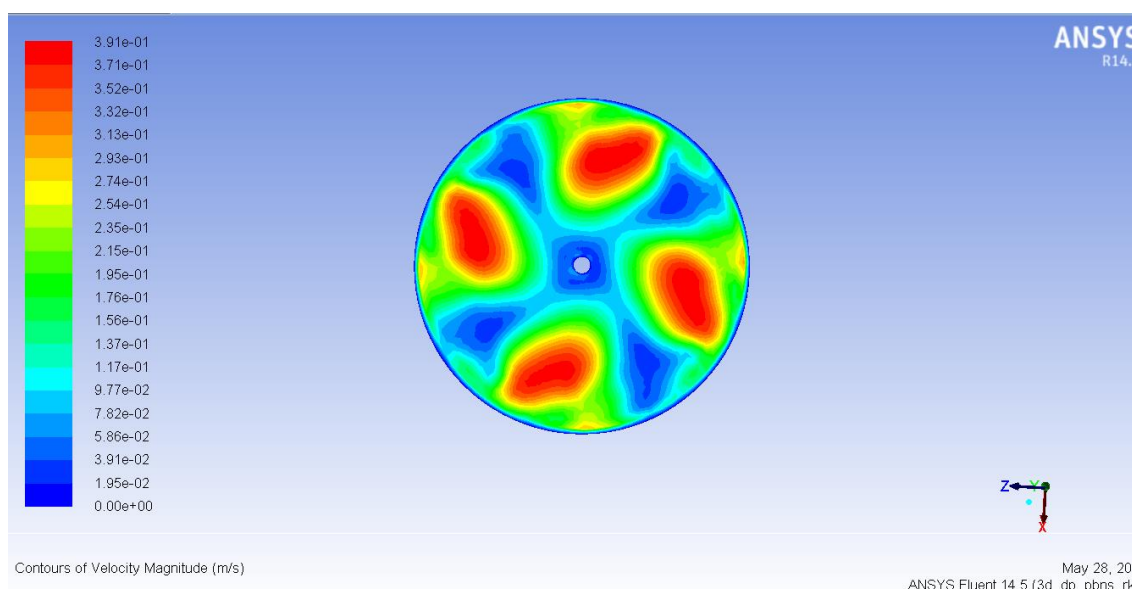


Obrázek 28: Intenzita turbulence, a, reaktor T=2,67m, b, reaktor T=0,61m

Tok kapaliny od lopatek míchadla s rovnými skloněnými lopatkami obsahuje složky jak axiální, tak i radiální rychlosti. Axiální složka rychlosti má sice dominantnější charakter, nicméně při větším průměru míchadla se zvyšuje význam radiálního povahy proudění [11].

Profil rychlosti kapaliny získané CFD simulací na hladině kapaliny v nádrži s míchadlem většího průměru rovněž demonstruje tuto skutečnost, dají se tu identifikovat vysoké hodnoty rychlosti blíže k okrajům nádrže.

Tato skutečnost je důsledkem silnější radiální složky rychlosti většího míchadla. S kombinací se skutečností, že stahování turbulentním pohlcením závisí především na rychlosti kapalné fáze, může odlišný způsob stahování vůči malému reaktoru vysvětlovat právě přítomnost těchto vyšších hodnot rychlosti na hladině kapaliny.



Obrázek 29: Profil rychlosti na hladině kapaliny

### 8.2.1. Příkonové charakteristiky míchadla

Rychlost otáčení míchadla a moment působící na lopatky se určí obdobným způsobem jako při výpočtu příkonových charakteristik reaktoru s menšími rozměry. Následkem silnější radiální složky rychlosti většího míchadla je rychlost otáčení nutná ke ztržení všech částic menší než při míchadle malého reaktoru. Nevýhodou je ale, že míchadlo vyžaduje značně vyšší přísun energie.

Opětovně se vychází z rychlosti otáčení míchadla určené numerickou simulací:

$$N_{JD} = 115 \text{ rpm} = 1,917 \text{ s}^{-1}$$

Moment působící na lopatky bude:

$$T_q = 415,871 \text{ Nm}$$

Ze vztahu (18) se určí příkon míchadla:

$$P = 2\pi NT_q$$

$$P_{JD} = 2\pi N_{JD} T_q = 2 \cdot \pi \cdot 1,917 \cdot 415,87 = 5009,11 \text{ W}$$

$$V = 13,893332 \text{ m}^3$$

$$\frac{P_{JD}}{V} = \frac{5009,11}{13,89332} = 360,541 \text{ W/m}^3$$

Z hodnoty příkonu se stanoví příkonové číslo:

$$P_o = \frac{P}{\rho N^3 D^5} = \frac{5009,11}{998,2 \cdot (1,917)^3 \cdot (0,913)^5} = \frac{5009,11}{4461,05} = 1,123 [-]$$

Výsledky numerické simulace reaktoru větších rozměrů potvrzují dříve zmíněnou hypotézu, že při vyšších rychlostech otáčení míchadla se poměr částic vztáhnutých pod povrch kapaliny zvyšuje zhruba lineárně se zvyšováním rychlosti otáčení.

Jak již bylo zmíněno v předcházejících kapitolách, pro určení rychlosti nutné ke vztáhnutí částic a k tomu potřebného času vztahování se do modelu přidala okrajová podmínka „porous jump“ s nastavením „escape“. Tímto způsobem se vytvořil tenký film na povrchu kapaliny. V praxi to znamená, že po dosáhnutí této hladiny FLUENT přestane se sledováním částic. Když se přidá aproximace, že čas nutný ke vztáhnutí z povrchu bude uvažován, jako průměrný čas, kým se jednotlivé částice dostanou k ploše „escape“, dá se ověřit hypotéza, či v simulaci spočítané rychlosti nutné ke stržení částic splňují obecnou a přijatou časovou škálu vymezenou v definici rychlosti nutné k stržení všech částic.



V případě malého reaktoru byl průměrný čas částic strávený na hladině kapaliny 1,048 s, v případě reaktoru většího rozměru je tato hodnota 0,956 s. Obvykle se jako hraniční hodnota času bere rozmezí jedné až dvou sekund, v jiných případech dva až čtyři sekundy, co bylo v našem případě splněno. Výsledky simulace jsou shrnuté v tabulce 4:

	Reaktor T=0,61 m	Reaktor T=2,67 m
$V [m^3]$	0,16567697	13,89332
$V_{irz} [m^3]$	0.0062330961	0.52269469
$X [\%]$	1	0,5
$\rho_{poly} [kg/m^3]$	904	904
$m_{h_2o} [kg]$	165.37876	13868.324
$m_{poly} [kg]$	1.653786	69,34162
$T_{avg} [s]$	1,048	0,956
$N_{JD} [rpm]$	240	115
$N_{JD} [s^{-1}]$	4	1,917
$v_{max} [m/S]$	2,55	5,34
$P_{JD} [W]$	28,4	5009,11
$P_{JD}/V [W/m^3]$	171,41	360,541
$P_o [-]$	1,28	1,123

Tabulka 4: Shrnutí výstupů CFD simulace

## 9. Scale-up

Vzhledem k tomu, že výzkum míchání v průmyslovém měřítku představuje významnou finanční zátěž, návrh míchacích zařízení vychází z poznatků získaných ze studií provedených v laboratorním měřítku. Základným přístupem scale-up metod vychází z elementární geometrie. V případě míchaných nádrží je však dodržení úplné geometrické podobnosti v mnoha případech ovšem neúčelné [3], energetické poměry v míchací aparatuře nenavazují na poměry geometrické podobnosti. V takém případě je nutné využít jiného přístupu.

### 9.1. Scale-up výpočet pomocí P/V kritéria

Specifický příkon (P/V) je jedním z nejzákladnějších kritérií pro zvětšování měřítka míchacích zařízení. Je založen na rovnosti specifických příkonů pro rozměrově rozdílné soustavy. V našem případě vycházíme z rozměrů reaktorů použitých v simulaci, rozměry jsou shrnuté v tabulce 1. Specifický příkon je dán vztahem (19):

$$\cong N_{JD}^3 \cdot D^2$$

Využijeme rovnost specifických příkonů, z kterých se odvodí rovnice (35):

$$N_{JD1}^3 \cdot D_1^2 = N_{JD2S}^3 \cdot D_2^2$$
$$N_{JD2S} = N_{JD1} \left( \frac{D_1}{D_2} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (35)$$

Jako referenční hodnota rychlosti otáčení míchadla se aplikuje rychlost otáček menšího reaktoru zjištěna CFD simulací, která se dosadí do rovnice (35).

$$N_{JD1} = 4 \text{ s}^{-1}$$

$$N_{JD2S} = N_{JD1} \left( \frac{D_1}{D_2} \right)^{\frac{2}{3}} = 4 \left( \frac{0,203}{0,913} \right)^{\frac{2}{3}} = 1,46 \text{ s}^{-1}$$

Odchylna rychlosti otáčení získané zvětšováním měřítka spočítané a rychlosti otáčená získané simulací je zhodnocena v tabulce 5.

### 9.2. Scale-up výpočet pomocí Froudova kritéria

Froudovo kritérium vyjadřuje vliv tvorby středového nálevkovitého víru v míchacím zařízení. Z CFD simulace reaktorů je zřejmé, že vliv centrálního víru byl významnější ve větší nádrži. Ve výpočty vycházíme z formy Froudova kritéria vyjádřeno rovnicí (20):

$$\cong N_{JD}^2 \cdot D$$

Z rovnosti Froudových čísel se odvodí vztah (36):

$$N_{JD1}^2 \cdot D_1 = N_{JD2S}^2 \cdot D_2$$

$$N_{JD2S} = N_{JD1} \left( \frac{D_1}{D_2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (36)$$

Jako referenční hodnotu rychlosti otáčení míchadla znova využijeme hodnotu získanou simulací:

$$N_{JD1} = 4 \text{ s}^{-1}$$

$$N_{JD2S} = N_{JD1} \left( \frac{D_1}{D_2} \right)^{\frac{1}{2}} = 4 \left( \frac{0,203}{0,913} \right)^{\frac{1}{2}} = 1,886 \text{ s}^{-1}$$

Hodnota rychlosti otáček reaktoru většího rozměru je bezmála stejná s hodnotou získanou pomocí numerické simulace.

### 9.3. Scale-up výpočet pomocí konstantní obvodové rychlosti

Další možností je zvětšování měřítka pomocí konstantní obvodové rychlosti lopatek míchadla, která je definovaná vztahem (21):

$$\cong N_{JD} \cdot D$$

Z podmínky rovností obvodové rychlosti se odvodí vztah pro rychlost otáčení míchadla větší nádrže (37) :

$$N_{JD1} \cdot D_1 = N_{JD2S} \cdot D_2$$

$$N_{JD2S} = N_{JD1} \left( \frac{D_1}{D_2} \right) \quad (37)$$

Dosadíme rychlost otáčení menšího reaktoru získanou pomocí CFD simulace:

$$N_{JD2S} = N_{JD1} \left( \frac{D_1}{D_2} \right) = 4 \left( \frac{0,203}{0,913} \right) = 0,8894 \text{ s}^{-1}$$

## 9.4. Scale up výpočet pomocí specifického momentu

Specifický moment je definován rovnicí (22):

$$\cong \frac{N_{JD}^2 D^5}{V}$$

Z podmínky rovnosti specifických momentů se odvodí vztah pro rychlost otáčení míchadla větší nádrže:

$$\begin{aligned} \frac{N_{JD1}^2 D_1^5}{V_1} &= \frac{N_{JD2}^2 D_2^5}{V_2} \\ N_{JD2}^2 &= N_{JD1}^2 \left(\frac{D_1}{D_2}\right)^5 \left(\frac{V_2}{V_1}\right) \\ N_{JD2} &= N_{JD1} \left(\frac{D_1}{D_2}\right)^{\frac{5}{2}} \left(\frac{V_2}{V_1}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (38)$$

Po dosažení referenční hodnoty rychlosti otáčení míchadla obdržíme hodnotu rychlosti otáčení většího reaktoru, která je více než o polovinu menší, než hodnota získaná CFD simulací.

$$N_{JD2S} = N_{JD1} \left(\frac{D_1}{D_2}\right)^{\frac{5}{2}} \left(\frac{V_2}{V_1}\right)^{\frac{1}{2}} = 4 \left(\frac{0,203}{0,913}\right)^{\frac{5}{2}} \left(\frac{13,89332}{0,16567697}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$N_{JD2S} = 4 \cdot 0,0233 \cdot 9,15739 = 0,8534 \text{ s}^{-1}$$

Přidáním podmínky konstantní obvodové rychlosti se vztah popisující specifický moment může zjednodušit i na formu:

$$\frac{D_1^3}{V_1} = \frac{D_2^3}{V_2} \quad (38)$$

Tento vztah pro nás nemá praktické využití, rozměry obou reaktorů jsem mněl k dispozici.

## 9.5. Shrnutí

Mechanismus dějů probíhajících během míchaní je velice komplexní, a z tohoto důvodu se jenom málokdy může řešit analyticky. Praktické úlohy se řeší na pokusném modelu laboratorních velikostí. Ovšem v takových případech se musí zajistit aplikovatelnost výsledků modelového zařízení i pro podmínky průmyslových rozměrů, tj. je třeba se zabezpečit vhodné zvětšování měřítka míchaných zařízení [14]. Základem uplatnitelnosti experimentálních dat získaných na modelovém aparátu je teorie podobnosti [3]. Při zachování geometrické podobnosti zařízení lze vhodným výběrem určujících podobnostních

kritérií zabezpečit uplatnitelnost výstupů modelových zařízení i pro průmyslové rozměry [3]. Nicméně, obecně použitelní postup těchto procesů do dnešního dne neexistuje.

Za předpokladu turbulentního proudění (v našem případě potvrzeno), fyzikální podobnosti míchané tekutiny a zachování geometrických poměrů lze vztah opisující zvětšování měřítka obecně napsat ve formě:

$$ND^n = konst \quad (39)$$

Kde  $n$  bude exponentem zvětšování měřítka.

Dle závěrů Özcan-Taşkina [8], že kritéria zvětšování měřítka při vztahování částic plovoucích na hladině ve velké míře ovlivňuje také směr proudění kapaliny. Když míchadlo tlačí kapalinu vzhůru, může být dobrým nástrojem pro zvětšování nádrží specifický výkon. Pro míchadlo čerpající kapalinu směrem dolů, nevyhovuje žádná z nejznámějších obecných kritérií [8].

Pro danou konfiguraci jsem testoval čtyři kritéria zvětšování měřítka. Rozdíl mezi hodnotou rychlosti otáčení míchadla většího reaktoru získané CFD simulací a hodnotami získané výpočtem pomocí rovnosti speciálních momentů a pomocí konstantní obvodové rychlosti je více než 50 procent. Při zahrnutí chyby výsledků zjištěných pomocí CFD simulace vzhledem k experimentálním hodnotám (přibližně 10-15 procent), je zcela zřejmé, že rovnost konstantní obvodové rychlosti a rovnost speciálních momentů není vhodná pro zvětšování měřítka takové geometrické konfigurace.

Použitím kritéria rovnosti specifických příkonů se rozdíl mezi výsledky simulace a scale-up výpočtu snižuje 23,83 procent, ovšem při zahrnutí chyby CFD simulace je i tento rozdíl nevyhovující. Özcan-Taşkin udává přesnost predikce rychlosti otáčení v rozmezí  $\pm 30$  procent [8].

Nejakuřatnější výsledky dává zvětšování měřítka pomocí rovností Froudových kritérií. Hodnota rychlosti otáček reaktoru většího rozměru je bezmála stejná s hodnotou získanou pomocí numerické simulace. Nicméně, s hlubším ponořením míchadla [8] a potlačením vlivu centrálního víru, zvětšování měřítka na základě tohoto kritéria ztrácí na přesnosti.

Kritérium	$N_{JD2}[s^{-1}]$	$N_{JD2S}[s^{-1}]$	$\Delta N_{JD}[s^{-1}]$	$\Delta N/N_{JD2}$	$\Delta N/N_{JD2}[\%]$
P/V	1,917	1,46	0,457	0,238393	23,83933
Fr	1,917	1,886	0,031	0,016171	1,61711
Obv. rychlost	1,917	0,8894	1,0276	0,536046	53,60459
T/V	1,917	0,8534	1,0636	0,554825	55,48252

Tabulka 5: Výsledky scale-up výpočtů

## 10. Závěr

Úlohou mojí diplomové práce bylo rešerše současné odborné literatury o míchaných reaktorech s plovoucími částicemi a jejich simulacích. Na rešerši navazuje sestavení numerického výpočtového modelu systému s plovoucími částicemi.

V prvních kapitolách jsem stručně popsal děje probíhající v míchaných reaktorech, opsal jsem nejdůležitější mechanismy proudění a hlavní mechanismy způsobující stahování plovoucích částic: centrální vír, turbulentní pohlcení a „vlastní ztržení“ částic. Úvod práce také obsahuje některé obecné konstrukční zvyklosti míchaných nádob, vliv přítomnosti narážek a míchadla vhodné pro stahování lehčích částic, než míchaná vsádka reaktoru.

V třetí kapitole následovalo shrnutí základních algoritmů řešení rotačního pohybu ve výpočtové dynamice tekutin. Podrobněji se popisuje MRF model, který se pak později využil ve výpočtové části práci. V této kapitole se charakterizují také obecné výhody numerické simulace vůči experimentálně provedením studiím, vliv turbulence, nejznámější turbulentní modely CFD modelování a také Euler-Lagrangeova a Euler-Eulerova metody interakce různých fází s důrazem na popis Discret Phase Modelu.

Ve čtvrté kapitole jsem sepsal základní kritéria nutná pro zvětšování měřítka míchaných nádrží, což je jedním z nejdůležitějších otázek zkoušení míchacích procesů. Kapitola pojednává nejdůležitější upravené bezrozměrné kritéria.

Pátá, šestá a sedmá kapitola se zabývá přípravou simulace numerického výpočtového modelu systému s plovoucími částicemi. Pátá kapitola sumarizuje geometrické charakteristiky a rozměry míchaných nádrží, které se využili pro navazující numerickou simulaci. V šesté kapitole je popsána prostorová diskretizace objemu a hodnocení některých aspektů kvality buněk prostorové diskretizace. Následuje potvrzení předpokladu turbulence v nádrži, v obou zkoumaných případech bylo modifikované Reynoldsovo kritérium pro míchání vysoce nad přibližnou hraniční hodnotou přechodového režimu proudění (10 000). V případě menší nádrže byla hodnota  $Re = 48\,394$ , v případě velké nádrže byla hodnota  $Re = 829\,579,8$ .

Praktická část práce zahrnuje simulaci CFD modelu obou míchaných reaktorů. Určila se hodnota rychlosti otáčení míchadla, která je vhodná po stáhnutí částic v požadovaném časovém rozmezí. Obvykle se jako hraniční čas bere hodnota jedné až dvou sekund, v jiných případech 2 až 4 sekundy. Rychlost otáčení míchadla pro menší reaktor činila  $240\text{ rpm}$  a  $115\text{ rpm}$ . Obe hodnoty dobře korelují s experimentálními hodnotami pocházejících ze studie Özcan-Taşkina[8]. Průměrní čas stažení částic byl  $1,048\text{ s}$  pro menší reaktor a  $0,956\text{ s}$  pro reaktor větších rozměrů. Hodnoty vypočtených příkonových čísel se téměř shodují s hodnotami udávanými v literatuře. Profil proudění ve větším reaktoru má silnější radiální charakter, vliv centrálního víru je dominantnější, jako v menší nádrži.

Výstupy numerické simulace se využili pro testování nejznámějších kritérií zvětšování měřítka míchaných nádrží. Zhodnotila se možnost požití kritéria

rovnosti specifických příkonů, specifických momentů, obvodové rychlosti a Froudova kritéria. Kritérium rovnosti specifických příkonů, specifických momentů a obvodové rychlosti pro naši konstrukci nádrží nedává použitelné výsledky. Výjimkou je do jisté míry Froudovo kritérium, přesnost predikce však závisí na poměru ponoření míchadla vůči průměru nádrže.

## Seznam použité literatury

- [1] H.K. VERSTEEG, W. MALALASKERA. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Pearson Education, 2007
- [2] ANSYS FLUENT Documentation, Ansys Inc. (latest version)
- [3] STREK, F. *Míchání a míchací zařízení: určeno [také] posl. vys. škol chemickotechnologických a chem. i potrav. specializací strojních fakult.* 1. vyd. Praha: SNTL, 1977, 383 s.
- [4] ŠOB, F.: *Hydromechanika*. Akademické nakladatelství CERM, s.r.o. Brno. Leden 2002
- [5] KUZMANIC, N., LJUBIČIĆ B., *Suspension of floating solids with up-pumping pitched blade impellers, mixing time and power characteristics*. 2001, Chemical Engineering Journal Vol. 84 p. 325-333
- [6] OZCAN-TASKIN, G., McGRATH, G., *Draw down of light particles in stirred tanks*. 2001, Trans. IChemE, Vol. 79, Part A
- [7] OZCAN-TASKIN, G., WEI, H., *The effect of impeller to-tank diameter ratio on draw down of solids*. 2003, Chemical Engineering Science, Vol. 58, p.2011–2022.
- [8] OZCAN-TASKIN, G., *Effect of scale on the drawdown of floating solids*. 2006, Chemical Engineering Science, 60, 2871–2879.
- [9] KHAZAM, O., KRESTA M.S., *A novel geometry for solids drawdown in stirred tanks*. 2009, Chemical Engineering Research and Design, Vol. 87, p. 280-290.
- [10] WAGHMARE, Y. FALK, R. GRAHAM, L. KOGANTI, V., *Drawdown of floating solids in stirred tanks: Scale-up study using CFD modeling*, International Journal of Pharmaceutics 418 (2011) 243– 253.
- [11] PAUL, E.L., ATIEMO-OBENG V., KRESTA M.S., *Handbook of industrial mixing: science and practice*. Hoboken, N.J.: Wiley-Interscience, c2004, lxi, 1377 p.
- [12] PERRY, R.H., GREEN, D.W. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. [s.l.]: McGraw-Hill, 2008. 2704 s. ISBN 9780071422949.
- [13] HÁJEK, J., *Modelování s využitím CFD I.: Studijní materiál pro 2. stupeň magisterského studia*, 2008.
- [14] ŠULC, R., *Zvětšování měřítka v mechanicky míchaných nádobách. Habilitační přednáška*, ČVUT Praha, 2012.
- [15] DVOŘÁK, P. *Optimalizace šterbinové vztlakové klapky letounu*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2009. 89 s. Vedoucí diplomové práce Ing. Robert Popela, Ph.D.



- [16] ZHANG, S., MÜLLER D., ARELLANO-GARCIA H., WOZNY, G. *CFD Simulation of the Fluid Hydrodynamics in a Continuous Stirred Tank Reactor*, Chemical Engineering Transactions, 32, 1441-1446 DOI: 10.3303/CET1332241.
- [17] HIDEGHÉTY, A. *Modelování proudění suspenzí*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2013. 96 s. Vedoucí diplomové práce doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D.
- [18] ZWIETERING, Th.N., 1958. *Suspending of solid particles in liquid by agitators*. Chem. Eng. Sci. 8, 244–253.
- [19] CFD ONLINE. [online]. [cit. 2014-05-20]. Dostupné z: [http://www.cfd-online.com/Wiki/Mesh\\_classification](http://www.cfd-online.com/Wiki/Mesh_classification)
- [20] CHEMICAL PROESSING. [online]. [cit. 2014-05-20]. Dostupné z: <http://www.chemicalprocessing.com/articles/2005/519/>
- [21] POST MIXING OPTIMIZATION and SOLUTIONS. [online]. [cit. 2014-05-20]. Dostupné z: <http://www.postmixing.com/mixing%20forum/impellers/pbt.htm>
- [22] MONTANTE G., BAKKER A. (2004) *Solid-Liquid Multiphase Flow Validation in Tall Stirred Vessels with Multiple Impeller Systems*. Fluent Inc. Technical Note TN253.

## Seznam obrázků

Obrázek 1: a, Stahování částic skrz recirkulační smyčky b, Stahování částic z povrchu kapaliny mezi hřídlel a stěnou nádrže [7] .....	- 12 -
Obrázek 2: Lopatka ve výpočtové doméne SRF modelu .....	- 16 -
Obrázek 3: Výpočtová zóna vzhledem k ohnisku rotující oblasti .....	- 17 -
Obrázek 4: Rotující oblasti ve stacionární zóně, MRF model [2] .....	- 18 -
Obrázek 5: Hierarchie turbulentních modelů dle Blažka [15] .....	- 20 -
Obrázek 6: Simulace pohybu hladiny využitím VOF modelu [16] .....	- 23 -
Obrázek 7: Geometrická podobnost míchacích nádrží [20] .....	- 24 -
Obrázek 8: Závislost příkonového čísla pro míchadla vyvolávající radiální a axiální proudění [11] .....	- 27 -
Obrázek 9: Generované zobrazení míchaného reaktoru .....	- 30 -
Obrázek 10: Geometrie reaktoru a míchadla [8] .....	- 31 -
Obrázek 11: Typy buněk prostorové diskretizace [19] .....	- 32 -
Obrázek 12 Vektory nutné pro výpočet ortogonální kvality [2] .....	- 33 -
Obrázek 13: Nestrukturovaná prostorová diskretizace reaktoru. Většina sítě byla vytvořena hexahedra buňkami. ....	- 34 -
Obrázek 14: Kontury fiktivní rozřezání nádrže pro účely vytvoření kvalitní prostorové diskretizace.....	- 34 -
Obrázek 15: Hodnoty ortogonální kvality reaktoru v řezu plochou XY .	- 35 -
Obrázek 16: Vnitřní rotační oblast reaktoru, jediná zóna nádrže, která se síťovala s využitím tetrahedra buněk.....	- 35 -
Obrázek 17: Rozdělení reaktoru pro potřeby MRF výpočtu. ....	- 36 -
Obrázek 18: Residua simulace bez přítomnosti inertních částic.....	- 37 -
Obrázek 19: Residua simulace za přítomnosti inertních částic .....	- 38 -
Obrázek 20: Rozměry inertních částic .....	- 38 -
Obrázek 21: Rychlostní pole menšího reaktoru .....	- 42 -
Obrázek 22: Rychlost na lopatkách míchadla .....	- 42 -
Obrázek 23: Axiální složka rychlosti .....	- 43 -
Obrázek 24: Profil rychlosti na hladině kapaliny.....	- 43 -
Obrázek 25 Axiální složka rychlosti při stahování částic .....	- 44 -
Obrázek 26: Rychlostní pole většího reaktoru .....	- 46 -
Obrázek 27: Pohyb částic v kapalině .....	- 46 -

<b>Obrázek 28: Intenzita turbulence .....</b>	<b>- 47 -</b>
<b>Obrázek 29: Profil rychlosti na hladině kapaliny.....</b>	<b>- 47 -</b>

## Seznam tabulek

Tabulka 1: Rozměry rektorů a míchadel .....	- 31 -
Tabulka 2: Hodnoty šikmosti [2] .....	- 32 -
Tabulka 3: Hodnoty ortogonální kvality [2].....	- 33 -
Tabulka 4: Shrnutí výstupů CFD simulace.....	- 49 -
Tabulka 5: Výsledky scale-up výpočtů.....	- 53 -

## Seznam příloh

Příloha č. 1:

CD obsahující:

- a, Diplomovou práci v digitální podobě pdf
- b, case soubory
- c, data pro zobrazení výsledků v programu CFD-Post