

MODELLAZIONE DI LIQUIDI REATTIVI TURBOLENTI

A.A. Barresi



WORKSHOP

**LA FLUIDODINAMICA NUMERICA
NELL'INGEGNERIA DI PROCESSO**

30 Marzo 1999

Auditorium EniTecnologie

in collaborazione con

AIDIC

Associazione Italiana di Ingegneria Chimica
Divisione Process System Engineering

Agenda della giornata

mattino

- 9.00 – 9.10 : Apertura dei lavori
G. Donati, AIDIC
- 9.10 – 9.20 Introduzione
M. Bistolfi, EniTecnologie
- 9.20 - 10.00 Modellazione di liquidi reattivi turbolenti
A. Barresi, Politecnico di Torino
- 10.00 – 10.30 La CFD nell'ingegneria di processo: la soluzione Fluent
E. Colombo, Fluent Italia
- 10.30 – 11.00 L'uso della CFD per la simulazione di reattori aerosol
M. Masi, Politecnico di Milano
- 11.00 – 11.15 *Coffee-break*
- 11.15 – 12.00 Applicazione della CFD alla modellazione di recipienti agitati
A. Brucato, Università di Palermo
- 12.00 – 12.30 L'influenza della miscelazione sulla purezza del prodotto: il processo caprolattame.
P. Santucci, Enichem
- 12.30 – 13.00 La CFD nell'ingegneria di processo: alcuni esempi applicativi.
F. Podenzani EniTecnologie
- 13.00 – 14.15 *Business lunch*

Agenda della giornata

pomeriggio

- 14.15 – 14.45 Ottimizzazione di unità di processo innovative tramite CFD
P. Andreussi, TEA
- 14.45 – 15.15 Il codice CFX nell'ingegneria di processo
L. Bucchieri, Enginsoft
- 15.15 – 15.45 Studio idrodinamico di reattori air-lift a ricircolazione interna
R. Bagatin, Enichem
- 15.45 – 16.00 *Coffee-break*
- 16.00 – 16.30 Un metodo per l'integrazione di modellazione CFD e simulazione di processo
F. Bezzo, Imperial College (UK)
- 16.30 – 17.00 Upgrading del sistema di combustione di generatori di vapore di uso industriale mediante CFD.
A. Antifora, Ansaldo
- 17.00 – 17.30 Interpretazione di dati reologici attraverso una *model-based analysis*
A. Servida, Università di Genova
- 17.30 – 18.00 Discussione e conclusioni

MODELLAZIONE DI LIQUIDI REATTIVI TURBOLENTI

Antonello Barresi e Giancarlo Baldi

Dip. Scienza dei Materiali e Ingegneria Chimica, Politecnico di Torino
Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129 Torino

Nei processi in cui reazioni veloci e complesse vengono condotte con reagenti non perfettamente premiscelati, è necessario tener conto dell'interazione tra fluidodinamica e reazione chimica. Verranno presi in considerazione due tipi di processi: nel caso di reazioni veloci competitive omogenee, la fluidodinamica e le modalità di alimentazione influenzano la resa e la selettività verso il prodotto desiderato; nel caso di processi di precipitazione (ad esempio per la produzione di alogenuri d'argento), essendo in competizione la nucleazione e la crescita dei cristalli, le condizioni fluidodinamiche influenzano la morfologia e le dimensioni dei cristalli stessi.

Al Politecnico di Torino sono stati sviluppati in passato sia un approccio deterministico sia uno stocastico per simulare le prestazioni di reattori chimici: vantaggi e svantaggi dei due metodi verranno discussi, confrontando i risultati delle simulazioni con i valori sperimentali misurati in un apposito apparato.

L'approccio deterministico richiede lo sviluppo di un modello che descriva i fenomeni di "micromixing", su scala microscopica, da accoppiare ad un codice CFD per la previsione del campo di moto nell'apparato. Questo è relativamente agevole da fare, al di là delle complicazioni di tipo computazionale, se si adotta per il modello di micromixing un riferimento di tipo lagrangiano: buoni risultati ha dato per esempio il modello di "Engulfement" proposto da Bourne e Baldyga; non è però possibile, usando un riferimento lagrangiano, descrivere localmente il comportamento del reattore.

L'uso di un sistema di riferimento euleriano richiede d'altra parte l'utilizzo di un "modello di chiusura" per il termine di reazione chimica, che deve essere implementato all'interno del codice di calcolo. Purtroppo i modelli di chiusura diventano molto complessi qualora si debbano considerare due o più reazioni; ma il limite maggiore è rappresentato dal fatto che quelli sinora proposti sono insoddisfacenti sia sotto il profilo della correttezza teorica, sia sotto quello delle prestazioni.

Molto promettente è invece l'impiego delle *pdf* (probability density function); in questo caso il termine di reazione in campo turbolento viene valutato esattamente, ma è necessario introdurre dei modelli di chiusura per descrivere la miscelazione. Un codice *composition-joint pdf*, per geometrie semplici, è stato sviluppato al Politecnico di Torino. Esso risolve l'equazione di trasporto della *composition-joint pdf* (non facendo quindi alcuna ipotesi sulla forma della *pdf*), e utilizza un modello a cascata che tiene conto della natura spettrale della turbolenza per modellare il termine di micromixing; i valori del campo di moto e delle grandezze turbolente, richiesti dal modello, sono forniti dal codice CFD. Le prestazioni dei differenti modelli di chiusura turbolenti adottati dal codice CFD (Fluent®), *k-ε*, RSM, *k-ε/RNG*, sono state confrontate in un reattore a jet.

L'approccio *pdf* è stato anche applicato alla descrizione della nucleazione in un processo di precipitazione; l'obiettivo della ricerca in corso è l'introduzione nel codice *pdf* dei bilanci di popolazione, per poter descrivere anche la fase di crescita.

L'assunzione di una determinata forma della *pdf* semplifica i calcoli, ma introduce degli errori; si è infatti verificato, nel caso della nucleazione, che la forma può essere molto differente da quella di una distribuzione log-normale, quale normalmente si assume nel caso di generazione di una nuova fase.