Modelování a simulace pro chemicko-technologickou praxi

V současné době jsou v oblasti modelování a simulace k dispozici různé programy a SW balíky zaměřené na modelování fyzikálních dějů v různých oborech a vědních disciplínách. Není tomu jinak ani v takovém odvětví, jako je průmyslové chemie. Nahlédněme do výpočetní oblasti, kterou řada pracovníků ve školství i v komerčních firmách dobře zná a tou je MATLAB, který vyvíjí americká firma The MathWorks. MATLAB lze používat jako samostatný výpočetní nástroj, slouží však také jako výpočetní prostředí pro specializované knihovny (toolboxy) a produkty. Jedním z nich je FEMLAB, jehož výrobcem je švédská firma COMSOL, která svou činnost zahájila vývojem nadstavby pro řešení parciálních diferenciálních rovnic – PDE Toolboxem.

V posledních třech letech se FEMAB rozvíjí velmi rychle a ve spolupráci s MATLABem nabízí veškerý komfort, který uživatelé MATLABu dobře znají. FEMLAB patří k simulačním nástrojům, které často nazýváme jako Equation Based Modelling – EBM. Uživatel má k dispozici knihovnu parciálních diferenciálních rovnic (PDR), jejichž výběrem je zvolena potřebná aplikace. K dispozici je také obecný tvar PDR, kdy uživatel definuje úlohu podle svého vlastního zadání. Geometrický model popisuje jedna nebo více PDR, které ke svému řešení potřebují definici okrajových podmínek přiřazovaných jednotlivým částem geometrie. Podmínky bývají dvojího druhu – Dirichletova a Neumannova – podle toho, vyžaduje-li úloha zadávat počáteční hodnoty nebo jejich derivaci. Výhodou EBM oproti jiným metodám je přímé včlenění zadaných definic do numerického schématu, čímž není narušena stabilita a robustnost výpočtu.

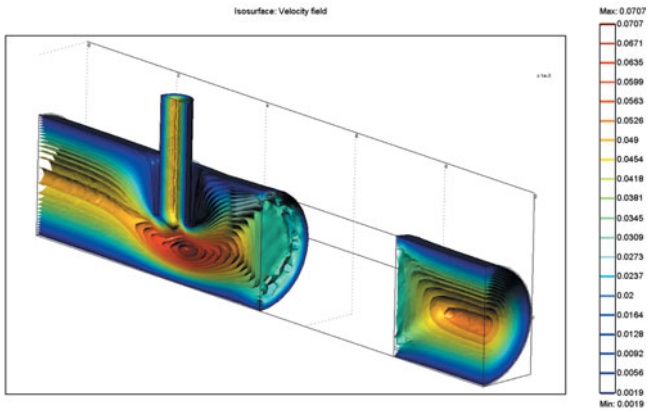
Vnitřní oblasti modelu popisují PDR, které mohou být zaměřeny i na více aplikací najednou. Odtud název multifyzikální řešení. V uzlových bodech generované sítě jsou nakonec vypočteny hledané hodnoty závisle proměnných veličin. Jedná se tedy o metodu konečných prvků (FEM).

V oblasti chemicko-inženýrských výpočtů jsou aplikace ve FEMLABu založeny na třech základních podmínkách – na rovnováze hmoty, energie a momentů. Momentovou rovnováhu splňují Navier-Stokesovy rovnice, nenewtonovské proudění, Brinkmanova rovnice a Darcyho pravidlo. Energetické rovnováze odpovídá prostup tepla, vedení a přenos tepla. Hmotovou rovnováhu popisuje difúze, vedení a difúze, Maxwell-Stefanova difúze a vedení a Nerst-Planckovy elektrokinetické modely. Všechny tyto aplikace jsou obsaženy v chemicko-technologickém modulu, který FEMLAB může ve specializovaných případech používat. Jedná se zde vlastně o rozšíření knihovny PDR.

Jedna z řešených úloh může být například modelování katalyzátorů výpočtem jejich heterogenních modelů, které zahrnují tekuté i pevné katalyzátory. Reaktanty jsou absorbované do jejich povrchu, kde reagují s jinými látkami nebo desorbují jako konečný produkt. Přesun látek na povrchu závisí na mechanice tekutin a EBM systémy tak pomáhají zkoumat vliv dynamiky tekutin na reakci katalyzátoru. Při detailním výpočtu je tekutý katalytický povrch matematicky modelován jako heterogenní geometrické rozhraní. Když je toto rozhraní velmi komplikované, používá se homogenizačních metod, které nakonec vedou k obecnému modelu proudění pórovitým médiem.

V následujícím příkladě je modelován katalyzátor s tekutou fází. Proudění tekutiny je modelováno pomocí Navier-Stokesových rovnic, které zaručují zachování momentů a hmoty. Výsledkem řešení je rychlost v prostoru a tlak v tekutině. V nejjednodušším případě nemá heterogenní reakce vliv na vlastnosti tekutiny, avšak při proudění s proměnnou teplotou, kdy dochází ke změně fáze nebo dochází k polymerizaci, se vlastnosti tekutiny mohou v průběhu reakce podstatně měnit.

Podle obrázku je ke studiu heterogenní katalýzy v experimentálním reaktoru zobrazeno proudové pole. Model se skládá z trubkové části a injektoru, který je kolmý na hlavní osu reaktoru. Látky vstupující do reaktoru a do injektoru reagují v pevném a pórovitém povrchu katalyzátoru. EBM spojuje proudění volné tekutiny a proudění pórovitým médiem popsaným Navier-Stokesovými rovnicemi a Brinkmanovým rozšířením Darcyho pravidla. To předpokládá, že vektor rychlosti je úměrný pouze tlakovému gradientu a nemá vliv na posuv momentů v jednotlivých vrstvách (ve střihu). Brinkmanovo rozšíření definuje střih jako transportní mechanismus pro momenty v pórovitých médiích.



Zobrazení rychlostního pole v experimentálním reaktoru

V modelu je vidět, že vstřikovací otvor je vzhledem pórovitému povrchu příliš malý. Reagující látky tak nejsou dostatečně promíchány a v pórovitém povrchu je využita jenom jejich část. Ve vhodnějším návrhu by mohl být za vstřikovacím bodem umístěn malý statický mixér nebo by mohl být injektor posunut dále směrem proti proudu. Během difúze by tak bylo dosaženo lepšího promísení reagujících látek. Častým problémem v heterogenních reaktorech nehomogenita reakční směsi, která vede společně s dalšími nedostatky k vytváření horkých míst uvnitř reaktoru, ke špatnému využití katalyzátoru a k jeho nadměrnému opotřebení. Modelování je v tomto případě cenný a zároveň levný způsob, jak v heterogenním reaktoru správně odhadnout a předpovědět rozložení reakční směsi a tím se vyhnout možným chybám při návrhu reaktoru.

V únoru letošního roku byla zákazníkům nabídnuta nová verze FEMLABu 3.0, která je ve srovnání s předchozí verzí rychlejší a má výkonnější grafiku. Navíc může využívat architekturu klient – server. Uživatel má tak možnost k výpočtům použít výkonných serverů. Další výraznou změnou je možnost práce FEMLABu jako samostatného programu nebo pracovat a komunikovat i nadále s MATLABem.

HUMUSOFT®

Humusoft s. r. o.

Karel Bittner
Novákových 6
180 00 Praha 8, ČR
Tel.: +420/284 011 730
Fax: +420/284 011 740
e-mail: info@humusoft.cz
http://www.humusoft.cz

64