

TIẾP CẬN MÔ HÌNH NGĂN TRỘN DỰA TRÊN MÔ PHỎNG CFD KẾT HỢP PHÂN TÍCH RTD MÔ TẢ ĐẶC TRƯNG DÒNG CHẢY TRONG BỂ CHỨA

TRẦN TRỌNG HIỆU¹, HUỖNH THỊ THU HƯƠNG¹, NGUYỄN THANH CHÂU¹,
LÊ VĂN SƠN¹

¹ Trung tâm Ứng dụng kỹ thuật hạt nhân trong công nghiệp,
Viện Năng lượng Nguyên tử Việt Nam
Email: hieutt@canti.vn

Tóm tắt:

Việc hiểu rõ đặc trưng dòng chảy trong bể chứa như thông tin động học, vùng thể tích chết, vùng hoạt động tối ưu giúp kiểm soát hiệu suất làm việc của bể. Hai phương pháp truyền thống được áp dụng để mô tả dòng chảy của bể kín: phương pháp tính toán động học dòng chảy (CFD) dựa trên việc giải các phương trình Navier–Stokes bằng phương pháp số - cung cấp thông tin chi tiết về hệ thống dòng chảy nhưng thường đòi hỏi thời gian tính toán lớn, và phương pháp phân tích phân bố thời gian lưu (RTD) dựa trên đường cong đánh dấu thực nghiệm - đơn giản trong tính toán nhưng không định xứ được các vùng chảy đặc trưng của hệ thống. Báo cáo này giới thiệu hướng tiếp cận phương pháp ngăn trộn (Compartmental Model - CM) với ưu điểm tổng hợp thông tin từ RTD và CFD, hứa hẹn khả năng mô hình hóa các hệ thống bể chứa phức tạp.

Từ khóa: mô hình ngăn trộn, CFD, RTD.

I. GIỚI THIỆU

Các bể chứa được sử dụng rộng rãi trong nhiều ngành công nghiệp như xử lý nước thải, nuôi trồng thủy hải sản, hay bể hòa trộn nhiều pha. Trong đó, thông tin động học chảy, vùng thể tích chết, vùng hoạt động tối ưu là các thông số quan trọng giúp người quản lý kiểm soát hiệu suất làm việc của bể. Tính toán động học dòng chảy (CFD) sử dụng phân tích số đưa ra lời giải chi tiết về dòng chảy của chất lưu bên trong hệ thống. Tuy nhiên, CFD phức tạp và đòi hỏi khối lượng thời gian tính toán lớn do đó hạn chế ứng dụng trong thực tế. Mô hình ngăn trộn (CM) là một cách tiếp cận thay thế cho phép giảm tải tính toán với chi phí thấp hơn CFD. Trong đó, hệ thống dòng chảy được đại diện bởi tổ hợp ngăn trộn tương ứng với các vùng dòng chảy cơ bản như hòa trộn lý tưởng, chảy nút, thể tích chết... với tiêu chí phân vùng dựa vào trường vận tốc của bể xác định từ CFD. Độ chính xác của CM phụ thuộc vào số lượng và thể tích các ngăn trộn cũng như sự kết nối giữa các ngăn.

Y.Le Moulec (2010) so sánh ba phương pháp mô hình hóa khác nhau gồm mô phỏng CFD, mô hình CM, mô hình Continuous Stirred Tank Reactor - CRTR trong mô hình hóa một bể xử lý chất thải. Bể xử lý được chia thành bốn ngăn bằng mô hình CM: một ngăn trung tâm có vận tốc thấp và động năng hỗn loạn thấp, một ngăn bao quanh ngăn trung tâm tương ứng với vận tốc cao và động năng hỗn loạn cao, một ngăn gần đầu vào bơm khí với vận tốc cao và động năng hỗn loạn lớn, ngăn cuối cùng đại diện cho vùng thể tích chết có vận tốc rất thấp và động năng hỗn loạn rất thấp. Kết quả cho thấy mô hình CM đã cho dự đoán chính xác về nồng độ dọc theo bể xử lý với tốc độ tính toán nhanh hơn so với mô hình CFD [1]. A. Delafosse (2010) và cộng sự nghiên cứu phát triển mô hình CM từ kết quả mô phỏng CFD để mô tả quá trình trộn trong bể sinh học. Mô phỏng CFD có thể cung cấp mô hình chi tiết về thủy động lực học và pha trộn, tuy nhiên thời gian tính toán lâu và mô phỏng phức tạp. Vì vậy, nghiên cứu này đề xuất một mô hình CM dựa trên kết quả mô phỏng CFD về trường vận tốc trong bể sinh học. Cách tạo các ngăn từ mô phỏng CFD được thực hiện bằng chia vùng thủ công hoặc tự động [2]. Việc nghiên cứu mô hình CM để mô tả quá trình thủy động lực học trong một bể ổn định chất thải cũng được thực hiện bởi A. Alvarado và cộng sự (2012). Nghiên cứu này trình bày một phương pháp sử dụng mô hình CFD đã được kiểm chứng bằng các thí nghiệm làm

nền tảng để phát triển mô hình ngăn Compartmental để mô tả hành vi thủy động lực học trong bể ổn định chất thải ở Cuaenda (Ecuador) [3]. S. Yang (2018) và cộng sự đề xuất một phương pháp tối ưu hóa quá trình trộn trong bể bằng cách sử dụng mô hình CM dựa trên kết quả mô phỏng CFD. Kết quả cho thấy có thể sử dụng mô hình CM để tối ưu hóa quá trình trộn trong bể [4].

Như vậy, việc thiết lập đúng các ngăn trộn là chìa khóa của phương pháp CM. Phân tích thời gian lưu trung bình (RTD) dựa trên đường cong nồng độ chất đánh dấu có thể được sử dụng như một cách để xác nhận mô hình CM, trong đó, mô hình hóa đường cong thực nghiệm RTD bằng việc thiết lập các ngăn sao cho đường cong RTD của mô hình CM phù hợp với thực nghiệm. Báo cáo này trình bày nghiên cứu tổng quan phương pháp CM dựa trên mô phỏng CFD và phân tích RTD mô tả đặc trưng dòng chảy trong bể chứa cơ bản không phản ứng hóa học và một số kết quả mô phỏng sử dụng phần mềm ANSYS ACADEMIC 2019R3.

II. NỘI DUNG

II.1. Đối tượng và phương pháp

II.1.1. Mô phỏng động học dòng chảy (CFD)

Mô phỏng CFD 3D mô tả bể chứa cơ bản với một đầu vào và một đầu ra trong nghiên cứu này được thực hiện bằng cách sử dụng gói phần mềm hỗ trợ học thuật FLUENT (ANSYS ACADEMIC 2019R3, Hoa Kỳ). CFD có thể mô phỏng sự vận chuyển của chất đánh dấu trong bể chứa theo ba hướng tiếp cận: (1) Eulerian – Lagrangian liên quan đến việc áp dụng phương pháp Eulerian cho pha liên tục và Lagrangian cho pha phân tán; (2) Eulerian – Eulerian liên quan đến việc áp dụng phương pháp Eulerian cho các pha mà không quan tâm đến mặt tiếp xúc pha; và (3) Thể tích chất lưu (Volume of Fluid – VOF) liên quan đến việc áp dụng phương pháp Eulerian cho các pha trong đó tính toán mặt tiếp xúc pha trên cơ sở thể tích. Trong nghiên cứu này, tiếp cận dựa trên thể tích các pha (VOF) được quan tâm. Phương trình thể hiện sự vận chuyển của từng pha (nước – pha liên tục, chất đánh dấu – pha rời rạc) [5]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = \sum S_k \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v v) = -\nabla \pi + \rho g + F \quad (2)$$

Với ρ và v lần lượt là khối lượng riêng và vận tốc của pha, S_k là tốc độ chuyển khối của các pha, g là gia tốc trọng trường, F là đại lượng trao đổi momen giữa các pha. Trong một đơn vị thể tích chứa nhiều hơn một chất lưu nên các phương trình trên được giải bằng cách sử dụng các tính chất của hỗn hợp chất lưu.

$$\rho = \sum \alpha_k \rho_k \quad (3)$$

Với α_k là tỷ phần thể tích của pha k trong đơn vị thể tích, được xác định bởi phương trình:

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + (v_k \cdot \nabla) \alpha_k = S_k \quad (4)$$

II.1.2. Phân tích phân bố thời gian lưu (RTD)

Việc ứng dụng phân tích phân bố thời gian lưu (RTD) dựa trên kết quả đánh dấu trong khảo sát hệ thống dòng chảy được khởi xướng bởi P.V. Danckwerts (1953) [6]. Đến nay, phương pháp đã trở thành một công cụ quan trọng nhiều lĩnh vực kỹ thuật và môi trường. Chất đánh dấu được bơm vào hệ thống tại lối vào và quan trắc nồng độ tại lối ra theo thời gian. Theo định nghĩa, phân bố thời gian lưu được tính dựa trên đường cong nồng độ chất đánh dấu ghi nhận tại đầu ra $C(t)$:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt} \quad (5)$$

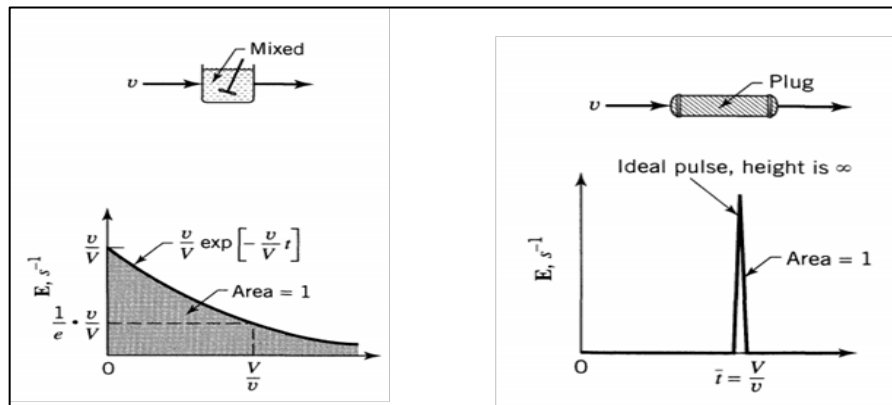
Thời gian chất đánh dấu ở trong hệ thống được gọi là thời gian lưu, được tính theo công thức:

$$\tau = \frac{\int_0^{\infty} C(t)tdt}{\int_0^{\infty} C(t)dt} \quad (6)$$

Đối với một chất lưu có khối lượng riêng không đổi chảy trong một hệ thống có thể tích V với tốc độ dòng chảy Q , thời gian lưu về mặt lý thuyết được xác định:

$$\tau = \frac{V}{Q} \quad (7)$$

Mô hình hóa dòng chảy từ dữ liệu thực nghiệm RTD có nghĩa là biểu diễn đường cong thực nghiệm bằng một hàm lý thuyết đã biết như minh họa trong Hình 1.



Hình 1. Phân bố thời gian lưu của kiểu chảy hòa trộn lý tưởng $E(t) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$ (trái) và phân bố thời gian lưu của kiểu chảy nút $E(t) = \delta(t - \tau)$ (phải) [7].

II.1.3. Mô hình ngăn trộn (CM)

Mô hình ngăn trộn (CM) xây dựng hệ thống dòng chảy gồm tổ hợp các ngăn trộn tương ứng với các vùng dòng chảy cơ bản như hòa trộn lý tưởng, chảy nút, thể tích chết... với tiêu chí phân vùng dựa vào trường vận tốc của bề xác định từ CFD. Sau đó, mô hình được xác nhận thông qua việc mô hình hóa đường cong RTD sao cho phù hợp với kết quả thu được từ thực nghiệm. Các bước thực hiện bao gồm:

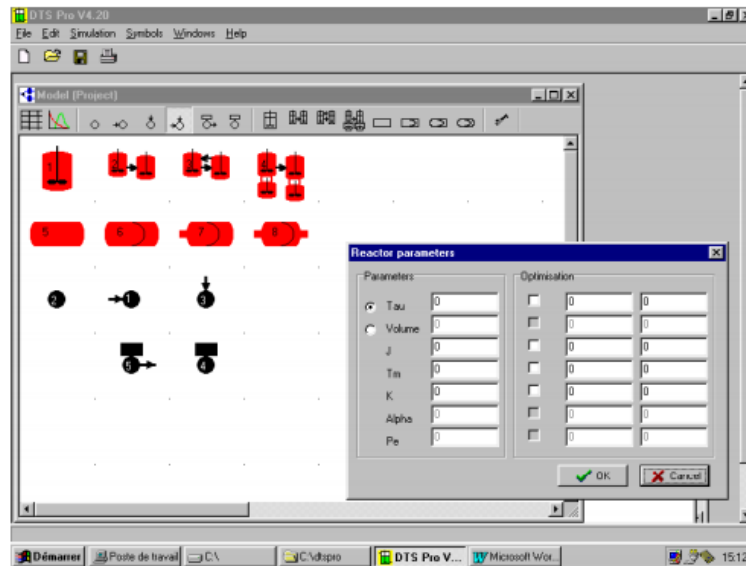
Bước 1. Xác định các vùng chảy [2, 8]:

- Khởi tạo: Tại thời điểm bắt đầu, tất cả các ô lưới đều được định nghĩa là không thuộc bất cứ vùng nào. Chọn giá trị dung sai ΔP . Giá trị dung sai ΔP càng nhỏ thì số vùng được tạo càng lớn.
- Bắt đầu tạo vùng: Chọn một ô chưa thuộc bất cứ vùng nào được xem là ô hạt giống của vùng mới. Ô hạt giống này thường có giá trị vận tốc v_{seed} thấp nhất hoặc cao nhất
- Phát triển vùng: Nếu ô liền kề của vùng mới được tạo chưa thuộc bất cứ vùng nào có giá trị vận tốc v thỏa mãn $|v_{seed} - v| \leq \Delta P$ thì ô đó thuộc vùng mới được tạo. Tiếp tục cho đến khi không còn ô nào thỏa mãn điều kiện.

- Kết thúc: Khi vẫn còn ô chưa thuộc bất cứ vùng nào, quay lại bước 2. Ngược lại, việc phân vùng kết thúc.

Bước 2. Xác định thể tích, thông số vận tốc trung bình từng vùng chảy

Bước 3. Xây dựng mô hình CM gồm các ngăn tương ứng với các vùng dòng chảy dựa trên các thành phần chảy cơ bản bằng phần mềm Progepi RTD 4.2.1.0. Phần mềm Progepi RTD phát triển bởi Phòng thí nghiệm khoa học kỹ thuật hóa học (Pháp) được giới thiệu như công cụ hữu ích trong việc xác định các mô hình ngăn trộn trên cơ sở đặc tính dòng chảy thủy động lực học của hệ thống [9, 10]. Giao diện phần mềm được minh họa như Hình 2.

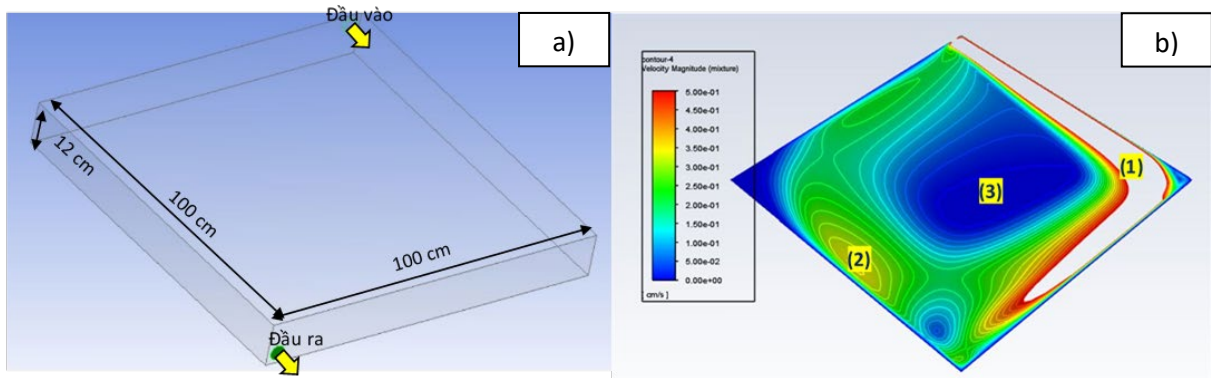


Hình 2. Minh họa giao diện phần mềm Progepi RTD [10].

Bước 4. Mô hình hóa đường cong RTD trên CM sao cho phù hợp với kết quả RTD thu được thí nghiệm đánh dấu.

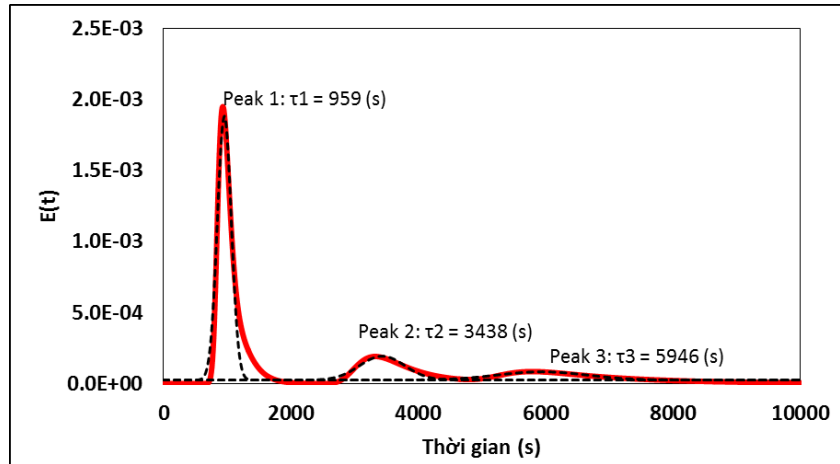
II.2. Kết quả

Phần mềm hỗ trợ học thuật FLUENT (ANSYS ACADEMIC) được sử dụng để mô phỏng động học dòng chảy của bể chứa cơ bản không phản ứng hóa học. Bể chứa gồm một đầu vào và một đầu ra có bán kính bằng 2 cm, kích thước 100 cm x 100 cm x 12 cm như minh họa trong Hình 3a. Pha nước được bơm vào mô hình với lưu lượng 2,3 Lit/phút. Khối lượng riêng và độ nhớt của nước lần lượt là 998,8 kg/m³ và 0,01003 g.s/cm. Phân bố vận tốc theo mặt cắt ngang của mô hình (Hình 3b) cho thấy có ba vùng vận tốc chính: (1) vận tốc cao từ đầu vào đến đầu ra $v_{1tb} \geq 1$ cm/s, (2) vận tốc chậm hơn từ đầu ra đến đầu vào $v_{2tb} \sim 0,5$ cm/s và (3) vùng khuếch tán ở giữa và góc $v_{3tb} \sim 0$ cm/s.



Hình 3. Mô hình bể chứa cơ bản không phản ứng hóa học trên FLUENT (trái) và phân bố vận tốc theo mặt cắt ngang của mô hình (phải).

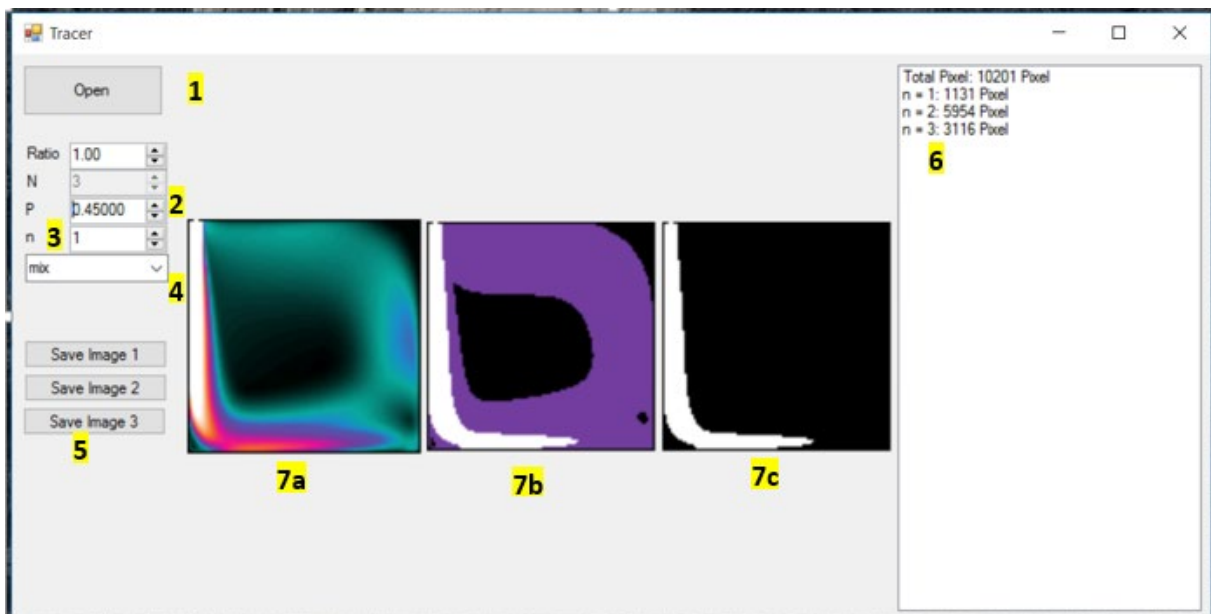
Tại $0 \leq t \leq 40$ (s), dung dịch muối NaCl được bơm vào bể chứa như chất đánh dấu. Khối lượng riêng và độ nhớt của dung dịch muối được giả định là 1000 kg/m^3 và $0,01003 \text{ g.s/cm}$. Mô hình VOF được sử dụng để tính toán phân bố nồng độ của chất đánh dấu trong mô hình mô phỏng. Phân bố thời gian lưu của chất đánh dấu $E(t)$ tại đầu ra của mô hình theo thời gian được trình bày như Hình 4.



Hình 4. Phân bố thời gian lưu của chất đánh dấu $E(t)$ tại đầu ra của mô hình.

Xác định các vùng chảy

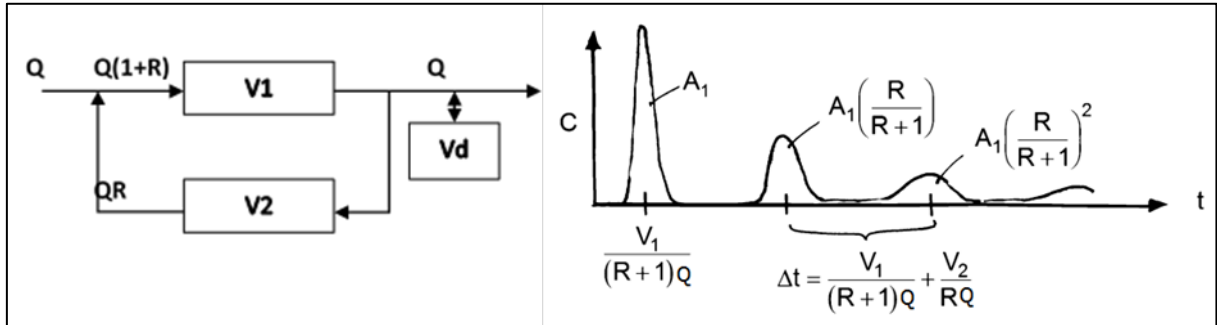
Chương trình chia vùng tự động được xây dựng trên phần mềm VISUAL STUDIO PROFESSIONAL 2012 version 11.0.50727.1 dựa vào kết quả phân bố vận tốc CFD và phương pháp chia vùng như đã trình bày ở phần mô hình ngăn trộn CM. Giao diện chương trình như Hình 5. Kết quả cho thấy có ba vùng chảy chính trong mô hình: vùng chảy vận tốc cao $v_{1tb} \geq 1 \text{ cm/s}$ (màu trắng), vùng chảy tuần hoàn $v_{2tb} \sim 0,5 \text{ cm/s}$ (màu tím) và vùng thể tích chết $v_{3tb} \sim 0 \text{ cm/s}$ (màu đen).



Hình 5. Giao diện chương trình chia vùng 1. Mở file text dữ liệu vận tốc thu được từ CFD, 2. Lựa chọn $\Delta P = 0,45 \text{ cm/s}$, 3. Lựa chọn vùng muốn hiển thị, 4. Lựa chọn gam màu hiển thị, 5. Lưu hình ảnh, 6. Số ô thuộc từng vùng, 7a. Hình ảnh phân bố vận tốc, 7b. Hình ảnh các vùng được phân chia, 7c. Hình ảnh vùng được chọn.

II.3. Bàn luận

Phân bố thời gian lưu của chất đánh dấu (Hình 4) cho thấy tồn tại kiểu chảy tuần hoàn có thể tích chết trong mô hình, trong đó hàm phân bố gồm tập hợp các xung cách đều nhau. Áp dụng phần mềm ORIGINPRO 2019b version 9.6.5.169 để giải chấp phân bố, thời gian lưu trung bình của từng đỉnh xung tương ứng 959 (s), 3438 (s) và 5946 (s). Levenspiel (1999) minh họa kiểu chảy như Hình 6, trong đó V_1 là vùng vận tốc cao, V_2 là vùng chảy tuần hoàn với tỷ phần tuần hoàn R , V_d là vùng thể tích chết [7].



Hình 6. Minh họa kiểu chảy tuần hoàn với thể tích chết (trái) và phân bố thời gian lưu tương ứng của hệ thống.

$$\text{Tỷ số diện tích của các đỉnh xung liên kế: } \frac{R}{R+1} \quad (8)$$

$$\text{Thời gian lưu trung bình của đỉnh xung đầu tiên: } \tau_1 = \frac{V_1}{(R+1)Q} \quad (9)$$

$$\text{Độ chênh thời gian giữa các đỉnh xung: } \Delta t = \frac{V_1}{(R+1)Q} + \frac{V_2}{RQ} \quad (10)$$

Từ các Công thức (8-10), tính được tỷ phần tuần hoàn R của mô hình bằng 0,42, thể tích vùng vận tốc cao $V_1 = 52,1$ (Lít), thể tích vùng tuần hoàn $V_2 = 24,4$ (Lít) và thể tích vùng chết $V_d = 43,5$ (Lít) chiếm 36% tổng thể tích mô hình.

Trong thời gian tới, việc xây dựng mô hình CM dựa trên các thành phần chảy cơ bản bằng phần mềm Progepi RTD sẽ tiếp tục được hoàn thiện. Phương pháp sau đó sẽ được kiểm chứng trên kết quả thí nghiệm trong phòng thí nghiệm trước khi mở rộng ứng dụng với các bể chứa thực tế.

III. KẾT LUẬN

Báo cáo này đã trình bày nghiên cứu tổng quan phương pháp CM dựa trên mô phỏng CFD và phân tích RTD mô tả đặc trưng dòng chảy trong bể chứa cơ bản không phản ứng hóa học. Mô hình bể chứa giả định có kích thước 100 x 100 x 12 cm được xây dựng trên phần mềm ANSYS ACADEMIC. Kết quả trường vận tốc và phân bố thời gian lưu của mô hình sau đó được sử dụng để xác định các vùng chảy và thể tích tương ứng trong hệ thống.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Y.L. Moullec, et al. *Comparison of systemic, compartmental and CFD modelling approaches: application to the simulation of a biological reactor of wastewater treatment*. Chemical Engineering Science, 65, pp.343 – 350, 2009.
- [2]. A Delafosse, et al. *Development of a compartment model based on CFD simulations for description of mixing in bioreactors*. Biotechnol. Agron. Soc. Environ, pp. 517 – 522, 2010.

- [3]. A. Alvarado, et al. *A compartmental model to describe hydraulics in a full-scale waste stabilization pond*. Water Research, 46, pp. 521 – 530, 2012.
- [4]. S. Yang, et al. *Optimization of Reaction Selectivity Using CFD – Based Compartmental Modeling and Surrogate-Based Optimization*. Department of Chemical and Biochemical Engineering, Rutgers, 2018.
- [5]. Carl-Fredrik Mandenius. *Bioreactors: Design, Operation and Novel Applications*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA, 2016.
- [6]. P.V. Danckwerts. *Continuous Flow Systems: Distributions of Residence Times*. Chem. Eng. Sci., 2, pp.1-13, 1953.
- [7]. O. Levenspiel. *Chemical Reaction Engineering (Third Edition)*. John Wiley & Sons. 1999.
- [8]. F. Bezzo, S. Macchietto. *A general methodology for hybrid multizonal/CFD models. Part II. Automatic zoning*. Computers and Chemical Engineering, 28, pp. 513–525, 2004.
- [9]. IAEA. *Radiotracer Residence Time Distribution Method for Industrial and Environmental Applications*. 2008.
- [10]. IAEA-TECDOC-1262. *Radiotracer technology as applied to industry. Final report of a co-ordinated research project 1997–2000*. 2001.

APPROACHING THE COMPARTMENTAL MODEL BASED ON CFD SIMULATION COMBINED WITH RTD ANALYSIS TO DESCRIBE FLOW BEHAVIOR IN A BASIC TANK

TRAN TRONG HIEU¹, HUYNH THI THU HUONG¹, NGUYEN THANH CHAU¹,
LE VAN SON¹

¹ *Centre for Applications of Nuclear Technique in Industry, Vietnam Atomic Energy Institute.*
Email: hieuhtt@canti.vn

Abstract.

Understanding the flow characteristics in a tank such as dynamic parameters, dead volume zone, optimal operating zone helps to control tank performance. Two conventional methods are used to describe the flow of a closed tank: computational flow dynamics (CFD) method based on solving Navier – Stokes equations using the numerical method - providing detailed information about flow systems but often require large computational times, and the time residence distribution analysis (RTD) method based on tracer test - simple to calculate but does not locate flow zones in the system. This report presents the compartmental model (CM) approach with the advantage of synthesizing information from RTD and CFD, promising the possibility of modeling complex tank systems.

Từ khóa: *compartmental model, CFD, RTD.*