

# INSTACIONER HŐVEZETÉS REAKTORFALBAN

## INSTACIONER REACTOR WALL HEAT CONDUCTION

Bokros István \*

### ABSTRACT

One of my researching topic is the analysis of the heat transfer inside of the batch tank-type reactor. The examination needs the describing of the non-stationary temperature field. To determine as a function of the temperature field there are well known analytical and numerical methods [1], [2], during the usage of these difficulties were liable occur. Disposal of these, I developed an easy programmable calculation method what uses the finite difference method.

### 1. BEVEZETÉS

A szakaszos üzemű tartályreaktorokban lezajló hőátviteli folyamatokhoz kapcsolódó vizsgálataim során szükségem volt az időben változó hőmérsékletmező ismeretére. Ennek meghatározására több analitikus és numerikus módszer ismert [1][2], amelyek alkalmazása során sajnos számos problémába ütköztem, ezért kidolgoztam az elvégzendő feladat igényeihez igazított, könnyen programozható, a véges differenciák módszerét felhasználó számítási eljárást.

### 2. A VIZSGÁLT FOLYAMATOT LEÍRÓ ALAPEGYENLETEK

A hőforrást nem tartalmazó, merev, homogén és izotrop szilárd testekre vonatkozó általános egyenlet a termodinamika I. főtételéből levezethető a Fourier-féle hővezetési egyenlet felhasználásával [3]:

$$\rho c_p \frac{\partial t}{\partial \tau} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} t) \quad (1)$$

Állandó, hőmérsékletfüggetlen anyagjellemzőket feltételezve és bevezetve a hőmérsékletvezetési tényező  $(a = \lambda / \rho c_p)$  fogalmát kapjuk a hővezetés parabolikus típusú differenciálegyenletét:

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = a \nabla^2 t \quad (2)$$

Amennyiben a fajlagos hőkapacitás és a hővezetési tényező hőmérsékletfüggését nem hanyagolhatjuk el, akkor az egyenlet jobb oldala egy új taggal bővül

(nem elegendő a (2) egyenletbe egyszerűen csak a hőmérsékletfüggő anyagjellemzőket behelyettesíteni!).

$$\rho c_p(t) \frac{\partial t}{\partial \tau} = \lambda(t) \nabla^2 t + \frac{d\lambda(t)}{dt} (\nabla t)^2 \quad (3)$$

A relaxációs jelenséget is figyelembe vevő, állandó együtthatók mellett érvényes Cattaneo-Vernotte-féle hővezetési differenciálegyenlet [4]

$$\tau_r \frac{\partial^2 t}{\partial \tau^2} + \frac{\partial t}{\partial \tau} = a \nabla^2 t \quad (4)$$

már hiperbolikus típusú ( $\tau_r$ , a relaxációs idő). Ennek az egyenletnek az alkalmazása csak nagyon gyors hőmérséklet és hőáramsűrűség változásoknál indokolt. A gyakorlatban megvalósított eljárások esetében az anyagjellemzők hőmérsékletfüggésének mértékében a (2) vagy a (3) differenciálegyenlet megoldására van szükség.

### 3. A KÜLÖNBÖZŐ MEGOLDÁSI MÓDSZEREK ELŐNYEI ÉS PROBLÉMÁI

Az analitikus számítások vitathatatlan előnye, hogy a hővezetési differenciálegyenlet pontos megoldását adják, viszont ezek a megoldások bonyolultabb esetekre nem ismertek. A szorzatszeperációs eljárás egyszerű geometriák, konstans együtthatók és peremfeltételek esetén alkalmazható. Ugyanezzel a problémával szembeesülünk akkor is, ha a dimenziómentes egyenlettel való átalakítás módszerével keressük a megoldást. A Laplace-transzformációnál a kapott eredmény visszaalakításánál lépnek fel nehézségek [1]. Összességében elmondható, hogy a hővezetési differenciálegyenlet analitikus megoldására nincs univerzális módszer.

A mérnöki gyakorlatban a szilárd testekben lejátszódó hővezetés számítására a numerikus eljárások (véges differencia és végeselem módszer) terjedtek el. Mindkettőnek közös jellemzője, hogy a differenciálegyenlet megoldását diszkrét pontokban (hely és idő) adja meg, ellentétben az analitikus megoldásokkal. A diszkrét pontok között interpolációval kaphatjuk meg az eredményt. A numerikus módszereket alkalmazó számtalan programcsomag hozzáférhetősége a magas beszerzési ár miatt erősen korlátozott, ráadásul ezen programok bonyolultabb feladatokra történő alkalmazása hosszas betanulási időt, nagy tapasztalatot igényel.

\* mérnök tanár, ME Vegyipari Gépek Tanszéke

#### 4. VÉGES DIFFERENCIA MÓDSZEREK

A véges differencia módszer lényege, hogy a differenciálegyenlet deriváltjait a diszkrét pontok hőmérsékletkülönbségeiből képzett véges nagyságú hőmérsékletkülönbségekkel közelítjük. Így a differenciálegyenletből differenciaegyenletet kapunk, amit a szintén differenciaegyenletté alakított peremfeltételek felhasználásával, előre meghatározott diszkrét pontokban különböző számítási algoritmusok segítségével megoldunk.

A véges differencia módszer előnye, hogy inhomogén kezdeti és peremfeltételek esetén is megoldható a differenciálegyenlet, a hőmérsékletfüggő anyagjellemzők nem jelentenek gondot, a matematikai apparátus egyszerű, a számítás viszonylag gyors. Az instacioner hővezetési problémák esetén a három legelterjedtebb számítási algoritmus az explicit, az implicit és a Crank-Nicolson séma [5].

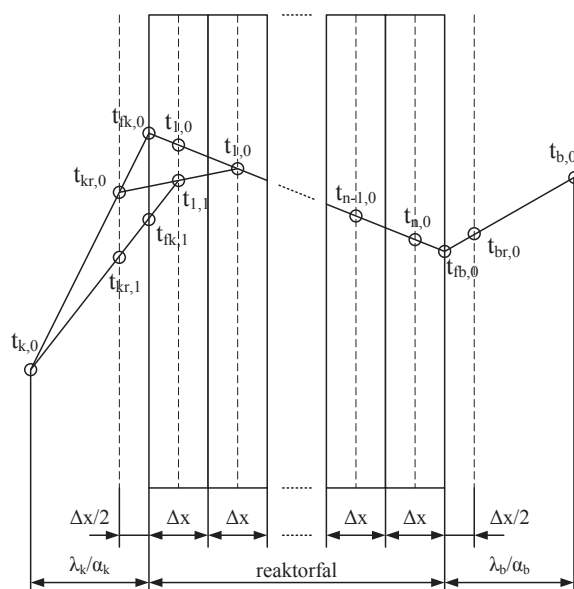
Az explicit séma előnye, hogy az egyes pontokban a hőmérsékletek egyszerűen, egy adott egyenletbe való behelyettesítéssel nyerhetők, de nagyon figyelni kell a numerikus stabilitásra. Szerencsére a legtöbb esetben a stabilitási határ meghatározása és betartása nem jelent különösebb gondot.

Az implicit és a Crank-Nicolson séma alkalmazása esetén nem merül fel stabilitási probléma, tetszőleges időlépés választható (túl nagy időlépés választása esetén nem nyerünk elegendő információt a problémáról!), hátrányuk viszont, hogy a megoldáshoz iteratív úton jutunk. Az iterációs eljárás optimális pontossági kritérium felállítását teszi szükségessé, a számítás időigénye csak ritkán kedvezőbb az explicit sémánál.

Mindezeket figyelembe véve az adott feladat esetén egy explicit eljárással dolgozó véges differencia módszer alkalmazása mellett döntöttem, amely lényegében a Schmidt-féle grafikus szerkesztési eljárás [6] kiterjesztett megfelelője.

#### 5. AZ ALKALMAZOTT VÉGES DIFFERENCIA MÓDSZER

Az általam alkalmazott módszer könnyebb bemutatása érdekében tekintsünk egy hőforrást nem tartalmazó egydimenziós hővezetési problémát. A reaktorfal legyen  $\Delta x$  vastagságú rétegekre osztva, az egyes rétegek hőmérséklete a réteg középvonalában van értelmezve (1. ábra). A fal két oldalától  $\Delta x/2$  távolságra a peremfeltételeket figyelembe vevő redukált (fiktív) hőmérsékletek lesznek meghatározva. Itt veszem fel a rétegkoordináták kezdő és végétékeit is.



1. ábra. A reaktorfal rétegeinek hőmérséklete a kezdeti időpontban

ahol:

- $t_k$  külső oldali közeg hőmérséklet
- $t_{kr}$  külső redukált hőmérséklet
- $t_{fk}$  fal külső szál hőmérséklet
- $t_n$  a réteg közepes hőmérséklete
- $t_{fb}$  fal belső szál hőmérséklet
- $t_{br}$  belső redukált hőmérséklet
- $t_b$  belső oldali közeg hőmérséklet

A falban a kezdeti hőmérsékleteloszlás ismert. Az adott esetben az alábbi differenciálegyenletet kell megoldani:

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} \quad (5)$$

A differenciálhányadosok átírására a következő összefüggéseket használom:

$$\left( \frac{\partial t}{\partial \tau} \right)_{n,k} = \frac{t_{n,k+1} - t_{n,k}}{\Delta \tau} \quad (6)$$

$$\left( \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} \right)_{n,k} = \frac{t_{n+1,k} - 2t_{n,k} + t_{n-1,k}}{(\Delta x)^2} \quad (7)$$

A differenciálegyenlet differenciaegyenletté való átalakításával láthatjuk, hogy a  $k+1$ -dik időpontban a hőmérsékletek egyszerűen kiszámíthatók az előző időpontbeli hőmérsékleteloszlás ismeretében. Az eljárás stabilitásának feltétele:

$$\frac{2a\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \leq 1 \quad (8)$$

Peremfeltételként a fal két oldalán lévő közegek hőmérséklete és a hőátadási tényezők ismertek, ezt nevezik III. fajú peremfeltételnek [6]. A fal felületén átadott hőmennyiségre érvényes összefüggés:

$$-\frac{\partial t}{\partial x} = \frac{\Delta t}{\lambda / \alpha} \quad (9)$$

A (9) egyenlet szerint a hőmérsékletet a falban leíró függvény deriváltjának értéke a fal felületén minden időpillanatban arányos a fal felületének és a vele érintkező közeg hőmérsékletének különbségével. Ez egy  $\lambda/\alpha$  meredekségű egyenesként ábrázolható. Ha a faltól  $\Delta x/2$  távolságra meghatározunk (ezt hasonló háromszögek alapján könnyen megtehetjük) egy fiktív (redukált) közeghőmérsékletet, akkor a peremfeltételt beépítettük a számítási algoritmusba, mint az a 0-dik és az  $n+1$ -dik réteg hőmérsékletét. Az 1. ábrán grafikusán is szemléltettem, hogyan lehet meghatározni az 1-es időpontbeli hőmérsékleteket a szélső rétegekben és a fal felületén.

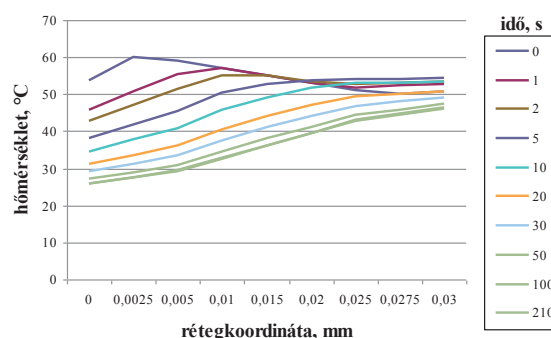
## 6. POLIMERIZÁCIÓS AUTOKLÁV FALÁBAN LEJÁTSZÓDÓ TRANZIENS JELENSÉGEK

A szakaszos üzemű polimerizációs autoklávokban a láncreakció beindítása előtt a klávban lévő anyagot felmelegítik a polimerizációs hőmérséklet közelébe, majd a reakció megindulásával a külső köpenybe hűtővizet engednek a reakcióhő elvonására. Az átváltást pillanatszerűnek tekintem, a kezdeti falhőmérséklet lineáris lefutása a falvastagság függvényében. A fal hővezetési tényezője állandó érték, a vizsgált tartományban hőmérséklettől való függése elhanyagolható mértékű. Kérdésként merült fel, hogy a falhűtésre való áttérésnél milyen hőáramok alakulnak ki, hogyan változik a falban a hőmérséklet az új stacionárius üzemállapot kialakulásáig. A tranziens jelenség időállandójának azt az időtartamot tekintem, amikor az új stacioner hőmérsékletet a program szerint számított érték 2%-ra megközelíti, ekkor már a folyamat állandósultnak tekinthető.

A számításokat a következő adatok felhasználásával végeztem el:

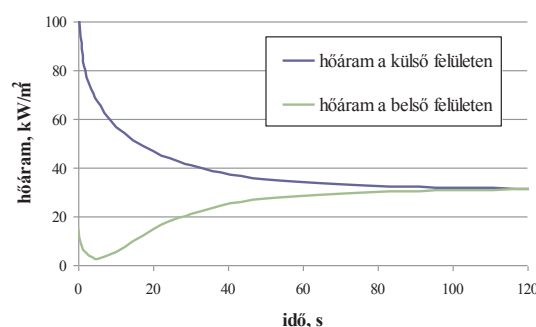
az autokláv köpenyének falvastagsága 24mm, a fal hővezetési tényezője 46W/mK, hőmérsékletvezetési tényezője  $1,25 \cdot 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$ , polimerizációs hőmérséklet 55°C, a belső oldali hőátadási tényező 3000W/m<sup>2</sup>K, a hűtővíz hőmérséklete 15°C, a külső oldali hőátadási tényező 2500W/m<sup>2</sup>K, a fal felületének hőmérsékletei a kezdeti időpontban (hőmérsékletlefutás a falban lineáris) 60°C és 50°C.

A réteghőmérsékletek alakulását néhány időpontban a 2. ábra mutatja. A magas hőátadási tényezők miatt az új stacionárius állapot gyorsan kialakul.



2. ábra. Réteghőmérsékletek alakulása szénacél fal esetén

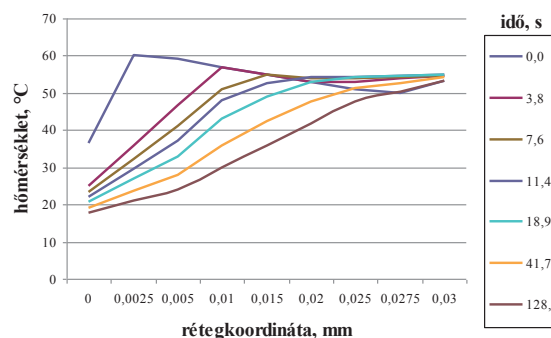
A program kiszámítja a fal felületén átmenő hőáramok pillanatnyi értékét (3. ábra), ezzel a hőelvonás sebességének megfelelőségét is meg lehet ítélni.



3. ábra. Hőáramok szénacél fal esetén

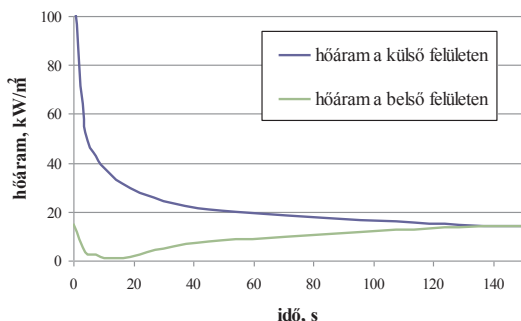
Az időben változó hőmérsékletmező ismeretében a fellépő hőfeszültségek is számíthatók, amelyek a vizsgálatom során elsősorban a kis hőmérsékletkülönbségek miatt ugyan jelentéktelen mértékűre adódtak, de más esetekben akár a reaktor geometriai paramétereinek, vagy szerkezeti anyagának megválasztásától is függően már nem elhanyagolható hőfeszültségeket eredményezhetnek.

További példaként bemutatom, hogy a reaktor szerkezeti anyagának megválasztása miként hat a tranziens hőátvitelre, valamint a hőátadási tényezők szerepének fontosságára is szeretném felhívni a figyelmet.



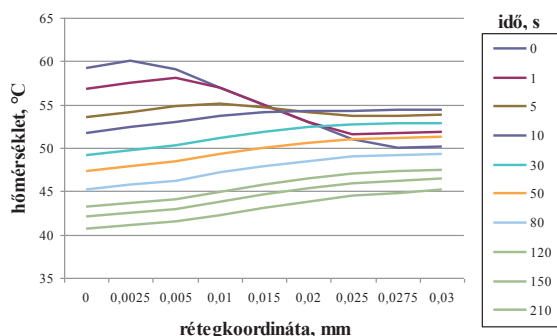
4. ábra. Réteghőmérsékletek alakulása ausztenites acélfal esetén

A 4. és 5. ábrán egy azonos kialakítású és működési paraméterű autokláv hőmérsékletei és hőáramai láthatók, de ebben az esetben a kláv szerkezeti anyaga ausztenites króm-nikkel acél. A megváltozó hővezetési tényező miatt ( $12\text{W/mK}$ ) a tranziens jelenség időállandója másfélszeresére növekszik.



5. ábra. Hőáramok ausztenites acélfal esetén

Amennyiben az elsőként vizsgált esethez képest a hőátadási tényezők értékeit kisebbre vesszük (belső oldali  $600\text{W/m}^2\text{K}$ , köpenyoldali  $200\text{W/m}^2\text{K}$ ), akkor a 6. ábrán látható réteghőmérsékletek alakulnak ki. A tranziens jelenség időállandója jelentős mértékben (négyyszeresére) nőtt meg.



6. ábra. Réteghőmérsékletek alakulása szénacél fal és alacsony hőátadási tényezők esetén

A polimerizációs autoklávban a belső hőmérséklet az intenzív keverés miatt nem függvénye a helynek, a duplikatúrában áramló hűtővíz hőmérséklete viszont változik a magasság függvényében is. A külső felületen átadódó, időben változó hőáram ismeretében a hűtővíz felmelegedésének mértéke a függőlegesen is felosztott elemi szakaszonként meghatározható. A hűtővíz hőmérsékletének hely és idő szerinti változását a kidolgozott program ismételt futtatásaival kaphatjuk meg.

## 7. ÖSSZEGLÉS

A szakaszos üzemű tartályreaktorok falában lejátszódo instacionárius hővezetés vizsgálatára, az előzőekben összefoglaltakat figyelembe véve egy explicit sémával dolgozó numerikus módszer alkalmazását tartottam megfelelőnek. A program segítségével meghatározható a tranziens jelenség során kialakuló hőmérsékletmező és a reaktor falának mindkét felületén kialakuló hőáram.

Mindezek ismeretében a hőelvonás sebességének megfelelősége is megállapítható, valamint meghatározhatóak a keletkező hőfeszültségek értékei is.

A bemutatott eredmények egy vizsgálatorozat kezdeti elemei, a továbbiakban az instacioner peremfeltételek és a reaktorfal hővezetési tényezőjének változásait (hőmérsékletfüggés figyelembe vétele, plattírozott lemezek) is beépítem a programba.

## 8. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A bemutatott kutatómunka a TÁMOP-4.2.1.B-10/2/KONV-2010-0001 jelű projekt részeként az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

## 9. JELÖLÉSJEGYZÉK

- a hőmérsékletvezetési tényező,  $\text{m}^2/\text{s}$
- $c_p$  fajlagos hőkapacitás (áll. nyomáson),  $\text{kJ/kgK}$
- t hőmérséklet,  $^\circ\text{C}$
- $\alpha$  hőátadási tényező,  $\text{W/m}^2\text{K}$
- $\lambda$  hővezetési tényező,  $\text{W/mK}$
- $\rho$  sűrűség,  $\text{kg/m}^3$
- $\tau$  idő, s
- $\tau_r$  relaxációs idő, s

## 10. IRODALOMJEGYZÉK

- [1] CZIBERE T. : Vezetéses hőátvitel, Miskolci Egyetemi Kiadó, 1998.
- [2] J.A.ADAMS-D.F.ROGERS: Hőátvitel-vizsgálatok számítógéppel, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1979.
- [3] KÖRNYEY T. : Hőátvitel, Műegyetemi Kiadó, 1999.
- [4] ÖZISIK, M.N.: Heat Conduction, John Wiley and Sons, New York, 1980.
- [5] ÖZISIK, M.N.: Finite Difference Methods in Heat Transfer, CRC Press, 1994.
- [6] FEJES-FÁBRY: Vegyipari gépek és műveletek II., Tankönyvkiadó, Budapest, 1975.