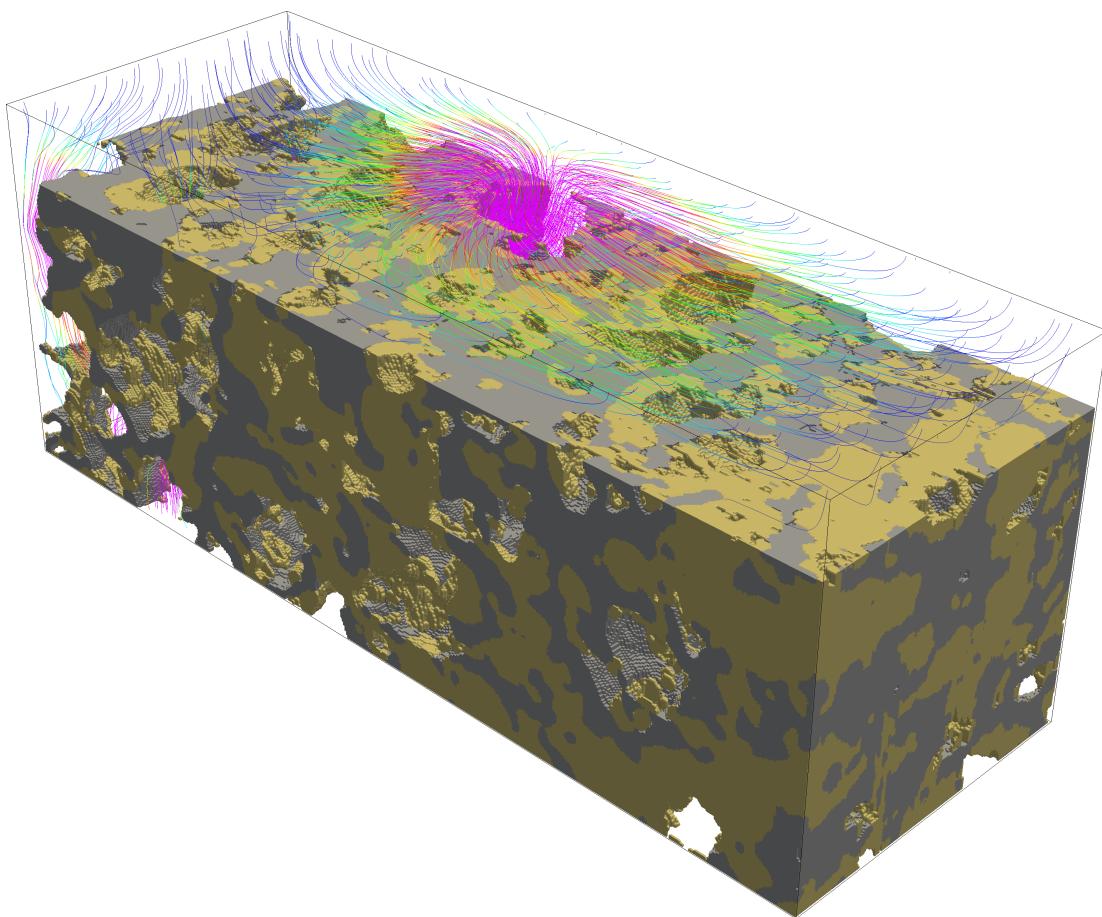


# 3. seminář VŠCHT k OpenFOAM

## OpenFOAM na VŠCHT



12. prosince 2017



ÚSTAV  
CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ



ÚSTAV  
MATEMATIKY



VYSOKÁ ŠKOLA  
CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ  
V PRAZE

## Obsah

Simulace expanze polyuretanových pěn ( <i>Pavel Ferkl, Mohsen Karimi, Daniele Marchisio, Juraj Kosek</i> )	2
Numerické řešení stlačitelného proudění, segregovaná a sdružená metoda ( <i>Jiří Fürst</i> )	3
Modelování toku a reakce v porézních materiálech ( <i>Marie Plachá</i> )	4
Numerical simulation of flow in the SuperPak packing family ( <i>Jakub Smutek</i> )	5
DEM-CFD study of flow in a random packed bed ( <i>Martin Šourek</i> )	6
Seznam přednášejících	7

# SIMULACE EXPANZE POLYURETANOVÝCH PĚN

Pavel Ferkl, Mohsen Karimi, Daniele Marchisio, Juraj Kosek

pavel.ferkl(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství*

Polyuretanové pěny jsou hojně používané jako materiál pro tepelné izolace, polstrování sedaček, postelové matrace, nebo různé autodíly. Pěny vznikají reakčním vstřikováním, při kterém expanze pěn probíhá současně s polymerační reakcí. Výsledné vlastnosti pěn závisí na morfologii pěn. Vhodnou volbou typu a množství reaktantů a vypěňovacích činidel lze připravit pěnu s požadovanou vnitřní strukturou. Prediktivní matematický model má potenciál nahradit časově náročné experimenty a pomoci při optimalizaci počátečního složení. Tento příspěvek představí model vypěňovacího procesu, který implementuje popis reakční kinetiky, termodynamických vlastností, růstu cel a toku pěny. Celkově se tedy jedná o problém na více prostorových škálách. CFD řešič OpenFOAM je použit pro makroskopický popis expanze pěny. Další modely, např. pro růst cel, rozpustnost vypěňovacích činidel, nebo reakční kinetiku, jsou napojeny pomocí frameworku MoDeNa. Výsledkem pak je vývoj teploty, hustoty pěny, distribuce velikosti cel a tvaru pěny.

# NUMERICKÉ ŘEŠENÍ STLAČITELNÉHO PROUDĚNÍ, SEGREGOVANÁ A SDRUŽENÁ METODA

Jiří Fürst

jiri.furst(at)fs.cvut.cz

*ČVUT Praha, Fakulta strojní, Ústav technické matematiky*

Přednáška bude věnována vývoji metody pro stlačitelné proudění založené na sdruženém řešení Navierových-Stokesových rovnic. V úvodu bude proveden stručný rozbor stávajících metod implementovaných v balíku OpenFOAM a budou zmíněny některé problémy spojené s využitím segregovaných řešičů (algoritmus SIMPLE). Poté bude prezentována implicitní metoda založená na tzv. Riemannových řešičích používající symetrickou verzi Gaussovy-Seidelovy iterační metody (LU- SGS). Vlastnosti této metody budou prezentovány na řešení několika jednoduchých testovacích případů. Nakonec budou ukázány některé aplikace této metody a to převážně pro problémy aerodynamiky vysokých rychlostí (obtékání leteckých profilů, průtok turbínou).

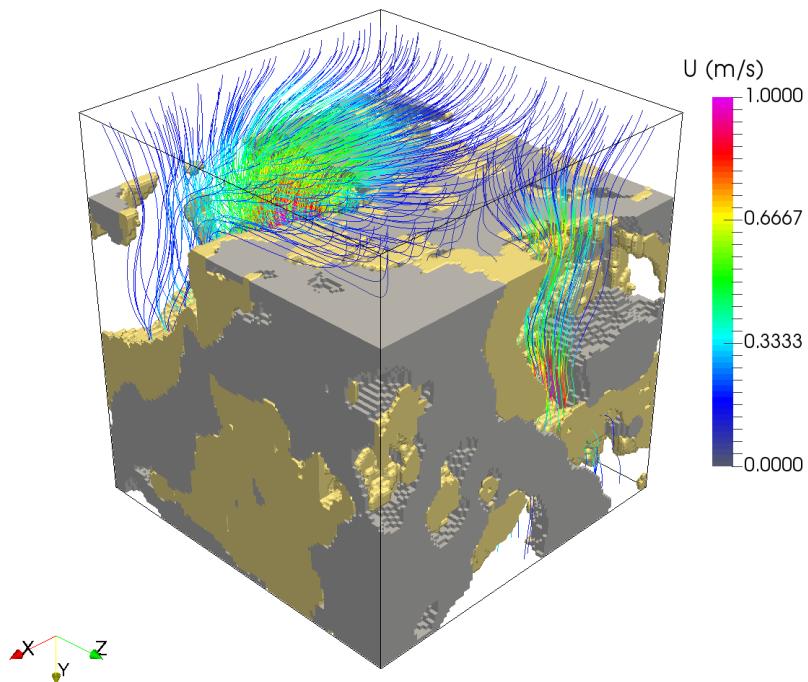
# MODELOVÁNÍ TOKU A REAKCE V PORÉZNÍCH MATERIÁLECH

Marie Plachá

vyhledkm(at)vscht.cz

VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství

V tomto příspěvku bude představeno řešení toku a reakce v porézním katalytickém materiálu. Jedná se o reálné struktury porézních katalytických filtrů pevných částic používaných v automobilovém průmyslu. 3D struktura je získána na základě dat z rentgenové mikrotomografie a následně převedena na výpočetní síť pro OpenFOAM. Tok v porézním materiálu je získán pomocí řešiče porousSimpleFoam a následně je řešena difuzně-reakční rovnice pro jednotlivé reaktanty pomocí nově vytvořeného řešiče.



Obrázek 1: Proudění v porézním katalytickém materiálu

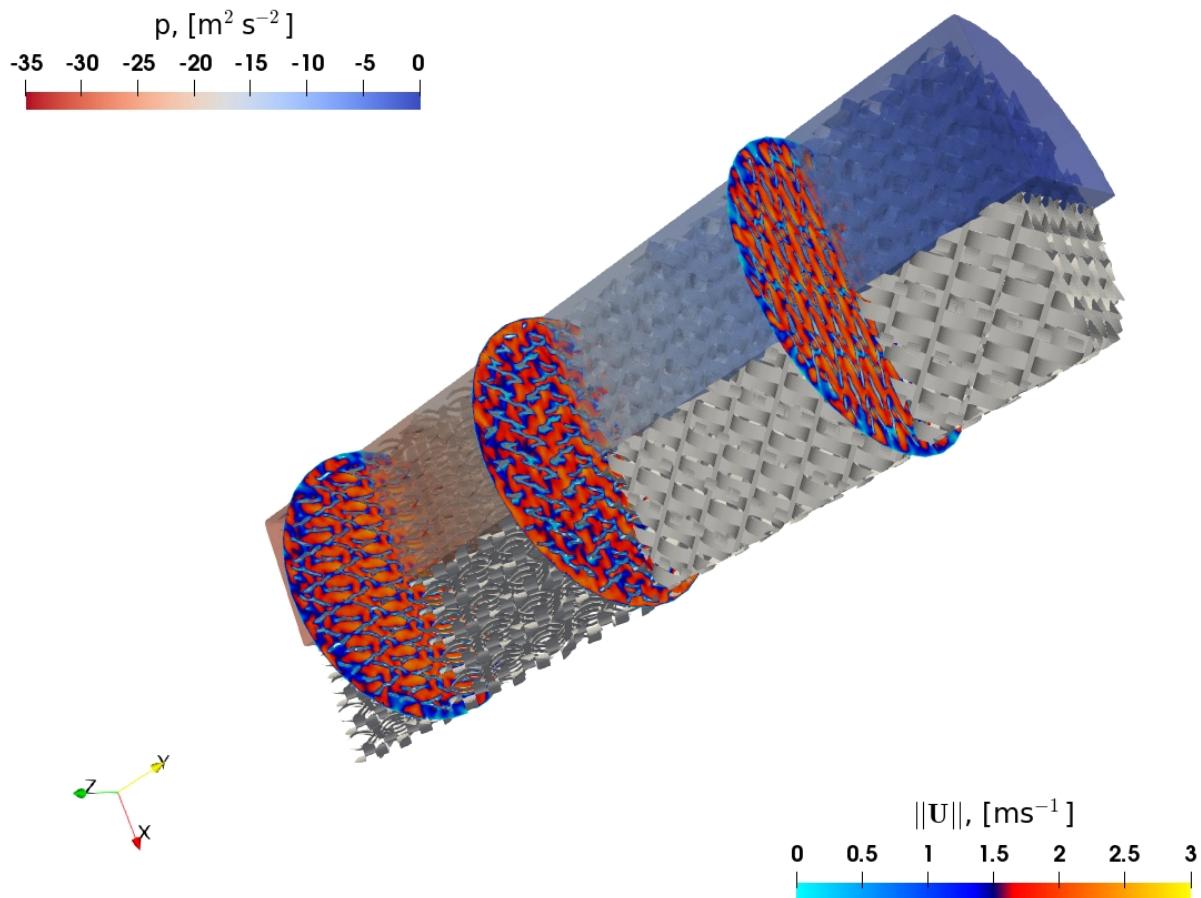
# NUMERICAL SIMULATION OF FLOW IN THE SUPERPAK PACKING FAMILY

Jakub Smutek

smutek(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav matematiky*

The distillation is currently the most energy-intensive technology of the chemical industry. Commonly, the distillation is performed in the columns filled with a structured packing. Structured packings are complex structures used to increase the size of the interface available for the mass transfer. Because of the complexity of the packings and of the physical phenomena occurring during the distillation, the design of the distillation columns is based mostly on empirical data. In this work, we focus on modeling the gas flow in the SuperPak family of structured packings. First, we propose an algorithm for generation of the packing geometry. Next, we construct and validate a three-dimensional computational fluid dynamics (CFD) model of gas flow through SuperPak 250.Y and SuperPak 350.Y packings. The model validation is done by comparing experimental data of dry pressure loss to the values computed by our model. The obtained difference between the CFD estimates and experiments is bellow 10%. Finally, we present a parametric study of the SuperPak 250.Y packing geometry. The devised modeling approach may be used for optimization of the SuperPak type packing geometry with respect to the gas flow. Furthermore, the proposed CFD model may be extended to account for the multiphase flow.



Obrázek 2: Gas flow in SuperPak 250.Y packing

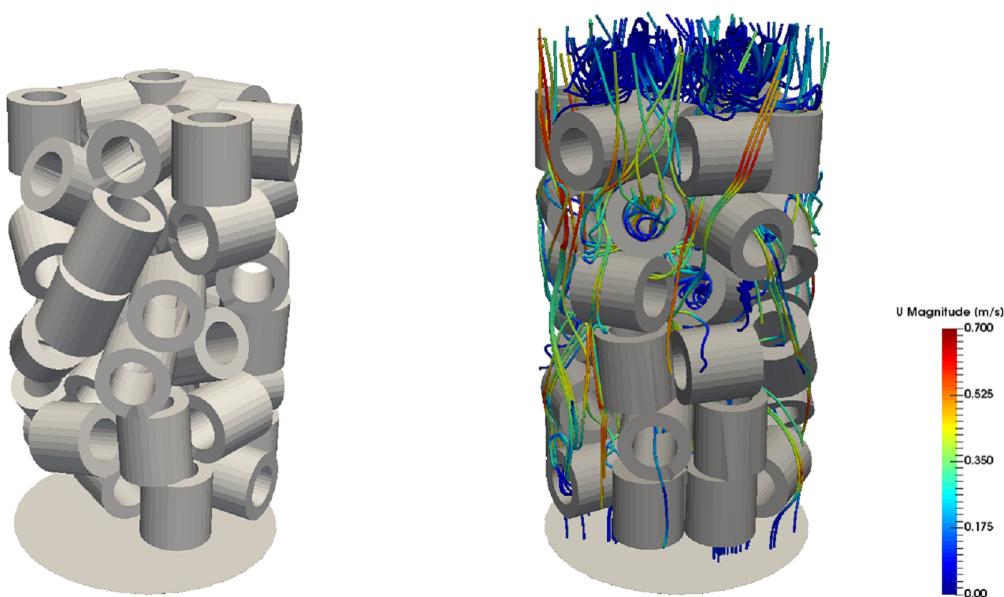
# DEM-CFD STUDY OF FLOW IN A RANDOM PACKED BED

Martin Šourek

sourek(at)vscht.cz

*VŠCHT Praha, Ústav matematiky*

Most catalytic surface reactions as well as other industrial applications take advantage of fixed packed bed reactors. Designers of these reactors rely mostly on empirical formulas derived for various simplifying assumptions, e.g. uniformly distributed porosity. The made simplifications and especially the assumption of uniformly distributed porosity fail if the tube to particle diameter ratio goes under 10 and the „wall effect“ becomes more significant. Thus, the complete three-dimensional structure of the packed bed has to be considered. Thanks to ongoing improvements in numerical mathematics and computational power, the methods of computational fluid dynamics (CFD) have become a great tool for comprehensive description of these problematic packed beds. Three-dimensional simulations of the flow through two fixed beds differing in the type of the used particle are presented and compared with available experimental and empirical results. To generate the random fixed beds, we propose a custom method based on DEM code implemented in open-source software Blender. Thereafter, OpenFOAM tools (snappyHexMesh, simpleFoam) are used for creation of the computational mesh and solution of the governing equations describing a single-phase flow in the packed bed.



Obrázek 3: Flow in random fixed bed made of Raschig rings

## **Seznam přednášejících**

Šourek

Martin, 6

Fürst

Jiří, 3

Ferkl

Pavel, 2

Plachá

Marie, 4

Smutek

Jakub, 5

