

شبیه‌سازی CFD هیدرودینامیک راکتور حبابی-دوغابی همزن دار تولید ترفتالیک اسید پتروشیمی شهید تندگویان

پژوهش‌نفت

سال بیست و چهارم

شماره ۷۹

صفحه، ۸۳-۹۴ ۱۳۹۳

تاریخ دریافت مقاله: ۹۰/۶/۲۶

تاریخ پذیرش مقاله: ۹۲/۳/۱۲

صادق پهلوانی، سید حسن هاشم آبادی* و امیر حیدری

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

واژه‌های کلیدی: راکتور حبابی-دوغابی همزن دار، دینامیک سیالات
محاسباتی، رویکرد شبه دوغابی، مدل اغتشاش RNG k-ε

مقدمه

راکتورهای حبابی-دوغابی، کاربرد وسیعی در صنایع مختلف از قبیل بیوتکنولوژی، تخمیر و واکنش‌های کاتالیستی هتروژن مانند تبدیل زغال‌سنگ، به ویژه سنتز سوخت مایع دارند [۱]. یکی از واکنش‌های مهم که در این نوع راکتورها انجام می‌شود، واکنش سنتز فشر-تروپش است که در سال‌های اخیر مورد توجه زیادی قرار گرفته است [۲]. راکتورهای همزن دار مکانیکی به طور گسترده در صنایعی که با سیستم‌های چند فازی سر و کار دارند، استفاده می‌شود. موارد متعددی از کاربردهای صنعتی این راکتورها توسط نیگام و شامپ در سال ۱۹۹۶ گزارش شده است [۳]. در تمام این کاربردها، پراکندگی همزمان فاز گاز و تعلیق ذرات جامد توسط همزن‌ها امری حیاتی است [۴]. با پیشرفت قدرت رایانه‌ها طی سال‌های اخیر، استفاده از تکنیک CFD در انجام محاسبات در جریان‌های

چکیده

در این مقاله اثر جهت همزن بر رفتار هیدرودینامیکی و نحوه هوادهی اسپارجرهای راکتور واحد ترفتالیک اسید پتروشیمی شهید تندگویان شبیه‌سازی گردیده است. شبیه‌سازی‌ها با رویکرد چندفازی اولرین-اولرین، مدل اغتشاش RNG k-ε به صورت ناپایا، سه بعدی و توسط نرم‌افزار Fluent 6.3.26 انجام گرفت. معادلات حاکم به روش حجم محدود برای تمام دامنه محاسباتی سیستم حل گردید و جهت شبیه‌سازی رفتار همزن در راکتور از مدل قاب چرخان استفاده شد. از آنجائی که هوای فشرده از پایین راکتور توسط چهار اسپارجر تزریق می‌شود، نتایج شبیه‌سازی نشان داد، همزن توربینی با جریان بالارونده سبب افزایش زمان ماند حباب‌ها و شدت اختلاط در بالای راکتور می‌شود. همچنین بیشتر انرژی این همزن صرف حرکت سیال شده و مقدار کمی از آن صرف اختلاط فازها می‌شود. برای همزن توربینی با جریان پایین رونده، جریان مایع، گاز خروجی از اسپارجرها را در خلاف جهت منحرف کرده و جریان گاز را به مرکز راکتور هدایت می‌کند.

و سرعت‌های ظاهری فاز گاز و مایع روی سرعت محوری فاز مایع و ماندگی فاز گاز بررسی شد که نتایج حاصل در مقایسه با داده‌های تجربی سرعت محوری-محلی فاز مایع، ماندگی محلی فاز گاز و سرعت‌های ظاهری فاز مایع و گاز حاکی از تطبیق خوب نتایج شبیه سازی بود. در این کار به دلیل سرعت کم جریان فازها، تنها نیروی درگ در معادلات مومنتوم وارد شده است.

ماتونیس و همکاران [۹] به بررسی هیدرودینامیک جریان در یک راکتور ستون حبابی سه فاز پی برداختند. در این کار از مدل KTGF^۴ برای توصیف اغتشاش فاز ذرات استفاده شد. با این تفاوت که ماتونیس و همکاران با توسعه یک کد CFD برای حل معادلات نویر-استوکس کوپل برای هر فاز، شبیه‌سازی را به صورت سه بعدی و ناپایا انجام دادند. پارامتر اصلی ورودی کد، ویسکوزیته فاز پراکنده (به صورت ذرات ریز) می‌باشد. در این کار نیز نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی، شامل ترم‌های سرعت و غلظت ذرات تطبیق خوبی دارد. فنگ و همکاران [۱۰] با استفاده از مدل شبه دوفازی به شبیه‌سازی راکتور ستون حبابی سه فاز به صورت سه بعدی در شرایط پایا و ناپایا پرداختند. آن‌ها از یک کد CFD به منظور گسسته‌سازی معادلات دیفرانسیل حاکم بر سیستم که شامل نیروهای درگ، لیفت و جرم مجازی می‌باشد، استفاده کردند. بررسی اثر پارامترهای عملیاتی بر تغییرات محوری، پروفایل ماندگی فاز گاز و سرعت محلی فاز مایع در این کار بررسی شد که نتایج حاصل تطبیق خوبی با داده‌های تجربی داشت. ژانگ و احمدی [۱۱] به منظور بررسی ساختار جریان و نحوه تغییرات الگوی جریان با تغییر اندازه حباب‌های گاز در یک راکتور ستون حبابی سه فاز، از آنالیز ردیابی لاگرانژ جهت بررسی هیدرودینامیک جریان بهره گرفتند. شبیه‌سازی به صورت دو بعدی، ناپایا و همراه با لحاظ کردن نیروهای درگ، شناوری، لیفت و جرم مجازی در معادله مومنتوم فاز گسسته انجام شد. در این کار به منظور گسسته‌سازی معادلات فازهای مایع، گاز و جامد به ترتیب

چند فازی افزایش یافته است. در سیستم‌های دو فازی، مسأله مهم برهم‌کنش‌های بین دو فاز پراکنده و پیوسته است [۱].

تحقیقات قبلی انجام شده در زمینه راکتورهای چندفازی به طور کلی بر روی مسائلی مثل کمی‌سازی ساختار جریان^۱ و شناسایی رژیم جریان^۲ تمرکز داشته است. در این موارد به مطالعه و بررسی موضوعاتی مانند ماندگی متوسط فازها به صورت کلی و محلی، سرعت فازهای مختلف در شرایط و پارامترهای عملیاتی متفاوت، تعیین الگوی جریان و نحوه گذار در رژیم‌های مختلف و توسعه الگوی جریان برای سیستم‌های مختلف پرداخته شده است [۵]. گریواسکات و همکاران [۶] با استفاده از مدل شبه دوفازی^۳، هیدرودینامیک جریان را در یک راکتور ستون حبابی سه فاز که فاز گاز به صورت حبابی در سیستم جریان داشت، بررسی کردند. آن‌ها مدلی برای توزیع اندازه حباب ارائه کردند که ضمن انطباق مناسب با داده‌های تجربی، پیشرفت تطبیقی خوبی نسبت به کارهای عددی قبلی ایجاد کرد. مجومدار و همکاران [۷] با هدف بررسی هیدرودینامیک جریان در یک راکتور ستون حبابی سه فاز، جریان سه فاز در یک ستون عمودی را به صورت دو بعدی و متقارن محوری شبیه‌سازی نمودند. برخلاف کارهای قبلی، آن‌ها از یک مدل اصلاح شده بین فاز مایع و ذرات حباب، جهت تعیین اثر ذرات جامد روی مخلوط و یک مدل اصلاح شده دیگر بین فاز مایع و ذرات جامد، جهت تعیین اثر ذرات حباب روی مخلوط استفاده کردند. در واقع هدف ایشان از انجام این کار، ارائه یک مدل جدید برای اصلاح نیروی درگ بین ترکیب‌های دو تایی فازها و لحاظ کردن اثر فاز سوم بر روی برهم‌کنش دو فاز دیگر بود. هم‌چنین در مدل ارائه شده توسط آن‌ها، بر هم‌کنش‌های بین ذرات جامد با اصلاح نیروی درگ اعمال شده بر روی فاز جامد، لحاظ گردید. نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی شامل تغییرات محوری غلظت جامد و تغییرات شعاعی سرعت فازها تطبیق خوبی را نشان داد. جیانینگ و شانگلین [۸] با استفاده از مدل شبه دوفازی هیدرودینامیک جریان در یک راکتور ستون حبابی سه فاز، را بررسی کردند. در این کار، برخلاف تحقیق گریواسکات و همکاران [۶]، اثرات بار جرمی جامد

1. Flow Structure Quantification
2. Flow Regime Identification
3. Pseudo-Two-phase Fluid Dynamic
4. Kinetic Theory of Granular Flow
5. Lagrangian Trajectory Analysis

به رفتار یک مخلوط تک فازی است. دانسیته فازهای جامد و مایع به ترتیب 1400 kg/m^3 و 1050 kg/m^3 و درصد حجمی فازهای جامد و مایع 40% می‌باشد. لذا در این کار به منظور کاهش هزینه محاسباتی از مدل شبه دوفازی استفاده شده است. بنابراین سیستم مورد بررسی یک راکتور همزن دار دو فازی است. راکتور حاوی مایع (دوغاب) بوده و فاز گاز (هوا) توسط اسپارجرهای لوله‌ای از پایین مخزن وارد می‌شود. مشخصات فازها در جدول ۱ داده شده است.

جدول ۱- خواص فیزیکی فازها

خاصیت	فاز گاز	فاز مایع
دانسیته (kg/m^3)	۱۷/۳	۹۸۰/۸
ویسکوزیته (Pa. s)	۰/۰۰۰۰۲۵۱	۰/۰۰۰۳۸۵۶

معادله پیوستگی و ممنتوم

به منظور شبیه‌سازی جریان چندفازی از رویکرد اولرین-اولرین استفاده شد. در این دیدگاه هر فاز پراکنده به عنوان یک فاز پیوسته رفتار می‌کند و تمام فازها در حل معادلات به اندازه کسر حجمی آن فاز سهم هستند. در این مدل فرض می‌شود که یک جزء حجمی از فاز k (α_k) در حجم کوچکی از فضا در هر زمان خاص وجود دارد، اگر به طور کل n فاز داشته باشیم، معادله پیوستگی برای هر فاز به شکل زیر است [۸]:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k) = \sum_{p=1, p \neq k}^n S_{pk} \quad (1)$$

$$\sum_k \alpha_k = 1 \quad (2)$$

در معادله فوق، ρ دانسیته، α کسر حجمی، u بردار سرعت و S_{pk} نرخ انتقال جرم از فاز p به فاز k ام می‌باشد که در این کار مقدار آن صفر است. معادله مومنتوم برای فاز k ام به شکل زیر نوشته می‌شود [۸]:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k u_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k u_k) = -\alpha_k \nabla p - \nabla \cdot (\alpha_k \tau_k) + \alpha_k \rho_k g + F_k \quad (3)$$

F_k ترم تبادل مومنتوم در سطح مشترک بین فاز k و فازهای دیگر موجود در سیستم می‌باشد.

از روش‌های تفاضل محدود، اولر و رانج کاتا استفاده شد. همچنین به منظور توصیف برهم کنش‌های ذره-ذره و حباب-حباب از مدل کره سخت با فرض کروی بودن حباب‌ها و ناچیز بودن گوناگونی شکل آن‌ها استفاده شد. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی نشان دهنده تطبیق خوب نتایج شبیه‌سازی است.

اسید ترفتالیک (TPA) یکی از مهمترین مواد شیمیایی واسط در صنعت پتروشیمی می‌باشد که به عنوان ماده اولیه برای تولید پلی اتیلن ترفتالات (PET) استفاده می‌شود. مهمترین فرآیند تجاری تولید اسید ترفتالیک، واکنش اکسایش پارا زایلن به وسیله هوا در فاز مایع در دما و فشار بالا می‌باشد. به دلیل پیچیدگی فرآیند و حضور هر سه فاز جامد، مایع و گاز و تنوع ترکیبات شیمیایی در این فرآیند، شبیه‌سازی و مطالعات عملکردی راکتور لازم به نظر می‌رسد. در کار حاضر، سیستم مورد بررسی یک راکتور حبابی-دوغابی همزن‌دار شامل یک همزن توربینی، چهار بافل تیغه‌ای و چهار اسپارجر لوله‌ای انحنادار می‌باشد. لذا با هدف بررسی تأثیر الگوی جریان ایجاد شده در اثر چرخش همزن بر نحوه هوادهی اسپارجرها از رویکرد اولرین-اولرین و مدل شبه دوفازی استفاده می‌شود. لازم به ذکر است یکی از نقاط قوت کار حاضر، انجام شبیه‌سازی در مقیاس صنعتی می‌باشد.

مدل سازی CFD

از آنجا که سیستم فعلی مقیاس بزرگ^۱ و صنعتی است، لذا از مدل شبه دوفازی استفاده می‌شود تا زمان شبیه‌سازی و متعاقب آن هزینه محاسباتی سیستم کاهش یابد. در این مدل، فاز مایع همراه با ذرات جامد به عنوان یک فاز همگن با دانسیته و ویسکوزیته مخلوط (جامد-مایع) در نظر گرفته می‌شود. هرگاه درصد بار حجمی ذرات جامد و سیال موجود در راکتور به هم نزدیک باشد، می‌توان از مدل شبه دوفازی استفاده کرد. همچنین هر چه قطر ذرات جامد ریزتر و اختلاف دانسیته بین فازهای جامد و مایع کمتر باشد، استفاده از مدل شبه دوفازی منطقی‌تر است. چرا که در این حالت مخلوط دو فاز مایع و جامد، همگنی مناسبی دارد و رفتارشان بسیار نزدیک

تقسیم می‌شوند. تفاوت‌های اساسی این مدل‌ها در روش یافتن ویسکوزیته درهم، اعداد پراکتل حاکم بر نفوذ اغتشاش در معادلات انرژی جنبشی^۱ (k)، معادله تلفات انرژی (ε)^۲ و جملات تولید و اتلاف انرژی در معادله ε می‌باشد [۱۶ و ۱۷]. در این شبیه‌سازی از مدل k-ε RNG استفاده شده است. معادلات اصلی در این مدل همان معادلات نسخه استاندارد می‌باشد که با استفاده از تئوری گروه اصلاح شده است. اهم این تصحیحات عبارتند از:

- اضافه شدن یک ترم به معادله ε جهت بهبود دقت محاسبات، برای جریان‌ها تحت تنش زیاد
- اعمال تأثیرات چرخش سیال بر روی اغتشاش جهت افزایش دقت محاسبات در جریان‌های چرخشی
- استفاده از یک رابطه تحلیلی جهت محاسبه اعداد پراکتل
- استفاده از رابطه‌ای تحلیلی جهت محاسبه ویسکوزیته موثر سیال جهت اعمال تأثیرات نواحی دارای رینولدز کوچک و نزدیک به دیواره
- این تصحیح در سیستم‌های متقارن، سیالات چرخشی و جریان‌ها سه بعدی استفاده می‌شود. از آنجا که جریان سیال در سیستم حاضر به صورت چرخشی با اغتشاشات دورانی زیاد می‌باشد، در این کار از مدل k-ε RNG استفاده شده است.

مش‌بندی، شرایط مرزی و مدل‌های حل

سیستم مورد بررسی یک راکتور حبابی - دوغابی همزن دار با کف انحناءدار با قطر ۵/۲ m و ارتفاع ۵/۲۷۵ m است. راکتور شامل یک همزن توربینی با چهار تیغه مورب، چهار بافل تیغه‌ای و چهار اسپارجر لوله‌ای انحناءدار می‌باشد.

مطابق شکل ۱ بافل‌ها به صورت متقارن در فواصل ۹۰ درجه از هم در کنار دیواره جانمایی راکتور قرار دارند. محور همزن در مرکز راکتور و اسپارجرهای لوله‌ای در بخش پایینی راکتور در زیر همزن قرار گرفته است.

اگر از انتقال جرم بین فازها صرف نظر شود F_k در بر گیرنده نیروهای درگ، نیروی بالابرنده^۱، نیروی شناوری، گرانش، سانتیفریوژ و جرم مجازی می‌باشد [۹]. بر اساس گزارشات موجود [۱۲-۱۴]، به جز نیروی درگ، سایر نیروهای بین فازی تأثیر محسوسی در برهم‌کنش‌های بین فازی در رفتار هیدرودینامیک مخازن همزن‌دار ندارند [۴]. لذا در این کار فقط نیروی درگ در معادلات مومنتوم وارد شده است. بنابراین در رابطه ۳، F_k فقط شامل نیروی درگ می‌باشد که از رابطه زیر حاصل می‌شود

$$F_D = \frac{C_D \cdot Re_d}{24} \quad (۴)$$

F_D تابع درگ^۲ است و برای مدل‌های مختلف ضریب درگ، تعریف‌های متفاوتی دارد. در این رابطه C_D ضریب درگ است که با استفاده از روابط تجربی به دست می‌آید [۱۵]. همچنین عدد رینولدز Re_d به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$Re_d = d_p |\vec{V}_d - \vec{V}_c| / \nu_c \quad (۵)$$

در این رابطه d_p قطر میانگین ذرات فاز پراکنده، \vec{V}_d و \vec{V}_c به ترتیب بردار سرعت فازهای پراکنده و پیوسته و ν_c ویسکوزیته سینماتیک فاز پراکنده می‌باشد [۱۵]. در این کار از مدل شیلر- نیومن^۳ به منظور پیش بینی ضریب درگ بین فازی استفاده شده است [۱۶]. رابطه مربوط به این مدل به صورت زیر می‌باشد:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} (1 + 0.15 Re_d^{0.687}) & Re_d \leq 1000 \\ 0.44 & Re_d \geq 1000 \end{cases} \quad (۶)$$

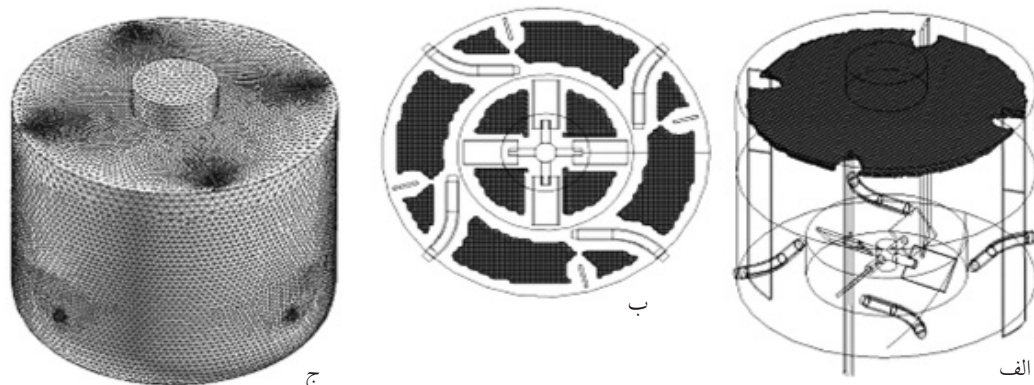
لازم به ذکر است که این ضریب درگ برای ذرات جامد و سیالی توصیه شده است که به اندازه کافی کوچک هستند و می‌توان از تغییر شکل آنها صرف نظر نمود. این شرایط بر فرضیات مسأله حاضر منطبق است.

معادلات اغتشاش

یکی از مسائل مهم در شبیه‌سازی‌های چند فازی، مدل کردن اثرات آشفتگی جریان می‌باشد. در این شبیه‌سازی از مدل اغتشاش k-ε برای بررسی پدیده آشفتگی در سیستم استفاده شده است [۱۵]. در این قسمت به بررسی اجمالی مدل اغتشاش مورد استفاده در این کار می‌پردازیم.

مدل‌های k-ε به سه مدل استاندارد، واقعی شده^۴ و RNG^۵

1. Lift Force
2. Drag Function
3. Schiller-Neumann
4. Realizable
5. Re-Normalization Group (RNG)
6. Turbulent Kinetic Energy
7. Dissipation Rate



شکل ۱ - شمای راکتور همزن‌دار (الف) ساختار هندسی سیستم، (ب) نمای فوقانی راکتور در حالت مش‌بندی شده و (ج) نحوه مش‌بندی کل سیستم

جدول ۳- مشخصات مش‌بندی‌ها

نوع مش	تعداد سلول	متوسط نسبت k-ε
مش نوع ۱	$1/2 \times 10^6$	۰/۰۸۰
مش نوع ۲	$2/1 \times 10^6$	۰/۱۱۵
مش نوع ۳	$3/4 \times 10^6$	۰/۱۲۱

شرایط مرزی مورد استفاده برای سطوح جانبی راکتور، همزن، بافل‌ها و اسپارجرها به صورت مرز دیواره غیر لغزشی است و برای دهانه اسپارجرهای هوا، شرط مرزی ورودی جریان جرمی در نظر گرفته شد. در بالای سطح مایع، یک ناحیه کوچک گاز تعریف شد که برای دهانه بالایی آن از شرط مرزی خروجی جریان استفاده گردید. قطر متوسط حباب‌های هوا ۲ mm تعیین شد و به منظور گسسته‌سازی معادلات حاکم بر سیستم از رویکرد QUICK و جهت حل معادلات گسسته از الگوریتم SIMPLE استفاده شد.

به دلیل اغتشاش بسیار زیاد جریان پس از گذشت مدت زمانی از شبیه‌سازی، فاز مایع از مخزن خارج می‌شود. ماهیت فاز مایع به گونه‌ای است که باید مقدار مایع درون سیستم ثابت بماند. لذا به منظور برقراری موازنه جرم مایع (عدم خروج مایع) از یک UDF استفاده شد. به عبارت دیگر بر روی دیواره جانبی مخزن یک ورودی جریان جرمی مایع ایجاد شد و با استفاده از کد CFD مقدار جرم مایع خروجی از بالای راکتور در هر لحظه محاسبه گردید. سپس همین مقدار مایع به صورت لحظه‌ای از طریق ورودی مذکور به سیستم تزریق شد تا مقدار جرم مایع

هندسه سیستم مذکور در محیط نرم افزار Gambit 2.4.6 ساخته شد. مشخصات هندسی سیستم در جدول ۲ ارائه شده است.

جدول ۲- مشخصات هندسی سیستم

پارامتر	مقدار (m)
قطر راکتور	۵/۲۰۰
ارتفاع راکتور	۵/۲۷۵
قطر همزن	۲/۶۰۰
ارتفاع همزن از کف راکتور	۱/۷۲۵
قطر داخلی اسپارجر	۰/۱۵۲۴
ارتفاع اسپارجر از کف راکتور	۱/۷۲۵

به منظور مش‌بندی سیستم از مش شش وجهی مکعبی استفاده شد. این مش ترکیبی از مش‌های ساختاریافته و غیرساختاری می‌باشد که برای هندسه‌های پیچیده مورد استفاده قرار می‌گیرد. تراکم مش بندی در نواحی نزدیک همزن، بافل‌ها و اطراف اسپارجرها به دلیل اختلاط شدید جریان، گرادیان بالای متغیرها و تشکیل گردابه‌ها و نواحی مرده احتمالی، بیشتر در نظر گرفته شد. همچنین جهت بررسی استقلال نتایج از تعداد مش، در هر مورد از شبیه‌سازی‌ها، مش بندی موجود ریزتر شده و شبیه‌سازی دوباره تکرار شده است. بر اساس متوسط k-ε در کل حجم راکتور که به عنوان معیار نسبت در جدول ۳ ارائه شده، مشاهده می‌گردد که نتایج مش نوع ۲ و ۳ نسبت به یکدیگر اختلاف کمی دارند. بنابراین برای محاسبات بعدی از مش نوع دوم استفاده شده است.

جدول ۴- مشخصات هندسی سیستم [۱۸]

پارامتر	مقدار (m)
قطر راکتور	۱۹۰
ارتفاع راکتور	۲۱۰
قطر همزن	۹۵
دور همزن	۳۰۰
ارتفاع همزن از کف راکتور	۶۳
قطر اسپارجر	۷۶
ارتفاع اسپارجر از کف راکتور	۳۸
ارتفاع مایع در راکتور	۱۹۰

آیین و همکاران توزیع سرعت را با روش PIV برای حالتی که همزن با سرعت ۳۰۰ rpm می‌چرخد و گاز با عدد هوادهی ۰/۰۱ از طریق اسپارجر حلقوی وارد مایع می‌شود، به دست آوردند. مطابق شکل‌های ۳ و ۴ پروفایل سرعت محوری مایع در راستای شعاع، بی‌بعد مخزن، به ترتیب در دو ارتفاع ۳/۶۱ cm و ۵/۸۹ cm از کف مخزن ترسیم شده است. در این شکل‌ها داده‌های تجربی آیین و همکاران [۱۸] با نقاط گسسته نشان داده شده است و منحنی‌های خط پیوسته و نقطه چین به ترتیب مربوط به نتایج شبیه‌سازی مورتی و همکاران [۴] و کار حاضر می‌باشد.

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که روند تغییرات شعاعی پروفایل سرعت محوری مایع در هردو مقطع، دارای انطباق قابل قبولی با داده‌های تجربی است. بنابراین رویکرد و مدل‌های استفاده شده در این شبیه‌سازی به خوبی رفتار سیستم را پیش‌بینی می‌کند. لذا از همین مدل‌ها برای شبیه‌سازی سیستم مورد نظر (راکتور صنعتی) استفاده گردید. در جدول ۵ مقادیر خطای حاصل از شبیه‌سازی‌های انجام شده مشاهده می‌شود.

تأثیر جهت چرخش همزن

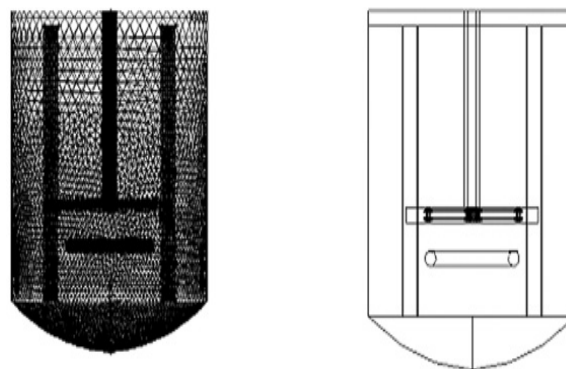
یکی از پارامترهایی که در اختلاط جریان نقش مهمی بازی می‌کند، جهت جریان سیال شامل جریان بالارونده و جریان پایین رونده می‌باشد.

درون مخزن ثابت بماند. معادلات حاکم به روش حجم محدود برای تمام دامنه محاسباتی سیستم حل شد و جهت شبیه‌سازی رفتار دورانی همزن از مدل قاب چرخان^۱ استفاده شد. در این روش دامنه محاسباتی به دو بخش ناحیه دورانی^۲ و ناحیه ساکن^۳ تقسیم می‌شود. تمام شبیه‌سازی‌ها به صورت ناپایا، سه بعدی و توسط نرم افزار Fluent 6.3.26 انجام شد.

بحث و بررسی

اعتبارسنجی مدل‌ها

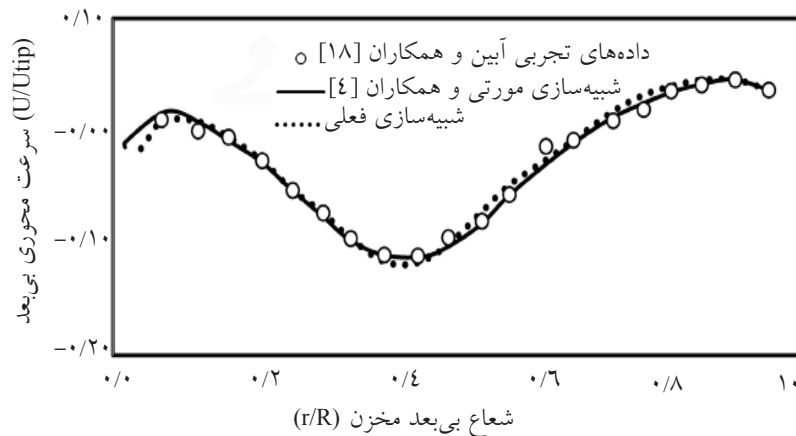
هدف از انجام شبیه‌سازی در این قسمت، اعتبارسنجی نتایج شبیه‌سازی از طریق مقایسه آن با نتایج گزارش شده توسط آیین و همکاران [۱۸] می‌باشد. شمای هندسی مخزن مورد نظر در شبیه‌سازی‌ها در شکل ۲ نشان داده شده است. در این شبیه‌سازی از مدل اولرین-اولرین برای بررسی رفتار فازها و از مدل k-ε استاندارد برای شبیه‌سازی جریان آشفته استفاده شده است. سایر معادلات، مدل‌ها و شرایط شبیه‌سازی همانند کار حاضر می‌باشد.



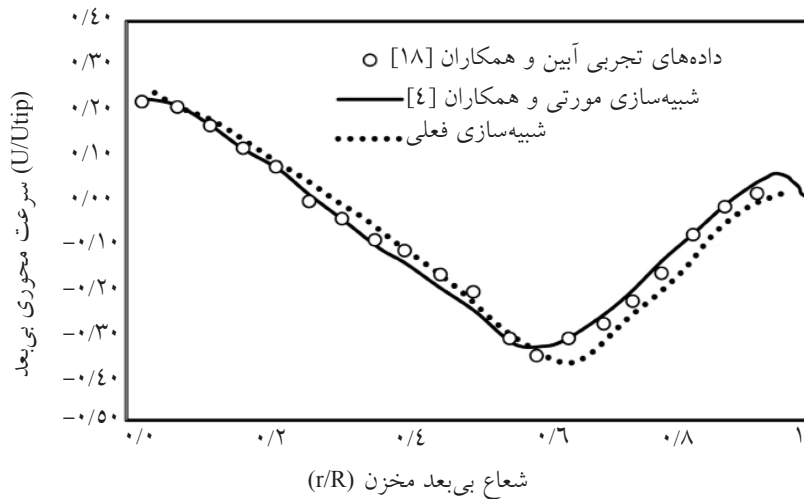
شکل ۲- شمای هندسی راکتور [۴]

مطابق شکل ۲، سیستم مورد بررسی یک راکتور حبابی همزن‌دار با کف انحنادار می‌باشد. راکتور شامل یک همزن توربینی شش تیغه‌ای، چهار بافل تیغه‌ای و یک اسپارجر حلقوی است. بافل‌ها به صورت متقارن در فواصل ۹۰ درجه از هم در کنار دیواره جانبی راکتور قرار دارند. محور همزن در مرکز راکتور و اسپارجر حلقوی در پایین همزن قرار گرفته است. مشخصات هندسی راکتور [۱۸] در جدول ۴ آمده است.

1. Multiple Reference Frame
2. Rotating Reference Frame
3. Stationary Reference Frame



شکل ۳- پروفایل سرعت محوری مایع در مقطع افقی $z=0.0361(m)$



شکل ۴- پروفایل سرعت محوری مایع در مقطع افقی $z=0.0589(m)$

جدول ۵- مقادیر خطای موجود در شبیه‌سازی‌ها

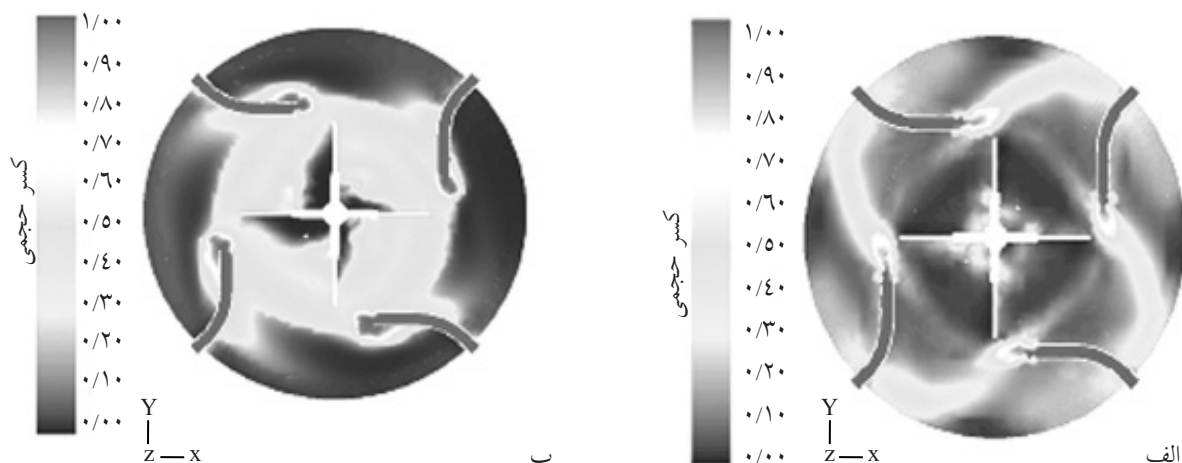
حالت شبیه‌سازی	RSME: $z=0.0361(m)$	RSME: $z=0.0589(m)$
شبیه‌سازی مورتی و همکاران [۵]	۰/۰۰۶	۰/۰۱۹
شبیه‌سازی حاضر	۰/۰۰۷	۰/۰۲۷

خارج می‌شود، حرکت کرده و به سمت کناره‌های راکتور جریان می‌یابد.

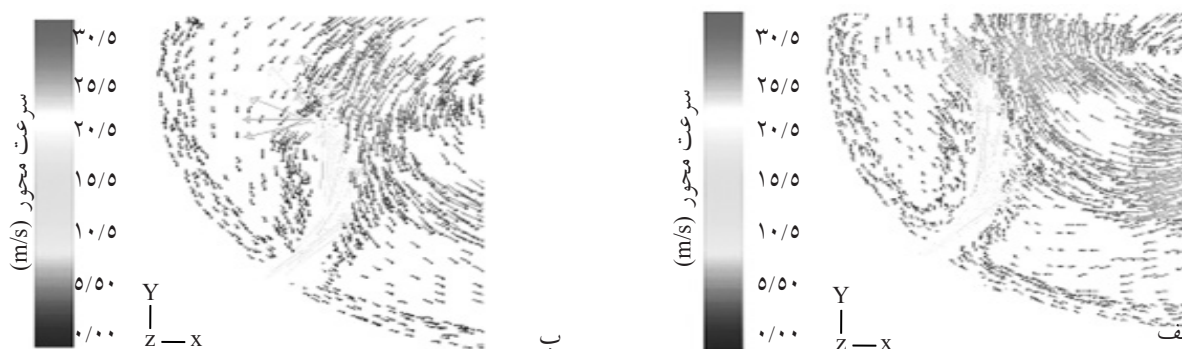
اما در حالت جریان پایین رونده، به دلیل این که جهت چرخش همزن خلاف جهت ورود گاز است، عملاً جریان مایع، گاز خروجی از اسپارجرها را در خلاف جهت منحرف کرده و جریان گاز را به مرکز راکتور هدایت می‌کند. این مسأله در شکل ۶ به طور واضح مشخص است. مطابق شکل دیده می‌شود که جهت بردارهای سرعت گاز در دهانه خروجی اسپارجر، برای جریان پایین رونده از مسیر مستقیم خود منحرف شده است.

از آنجا که همزن مورد استفاده در شبیه‌سازی از نوع توربینی با تیغه‌های مورب است، به منظور تعیین جهت جریان کافی است که جهت چرخش همزن تغییر یابد. لذا شبیه‌سازی برای دو حالت چرخش ساعت‌گرد و چرخش پادساعت‌گرد انجام گرفت.

در شکل ۵ کانتورهای کسر حجمی فاز گاز در صفحه افقی گذرنده از وسط پروانه برای همزن‌های ساعت‌گرد و پادساعت‌گرد رسم شده است. همچنان که در این شکل دیده می‌شود، برای حالت جریان بالارونده به دلیل این که جهت چرخش همزن در راستای خروجی گاز از اسپارجرهاست، گاز در همان راستایی که از دهانه اسپارجر



شکل ۵- کانتورهای کسر حجمی فاز گاز در صفحه افقی گذرنده از وسط همزن و اسپارجرها: الف) جریان بالارونده؛ ب) جریان پایین رونده



شکل ۶- بردارهای سرعت (m/s) فاز گاز در صفحه افقی گذرنده از وسط همزن و اسپارجرها: الف) جریان بالارونده؛ ب) جریان پایین رونده

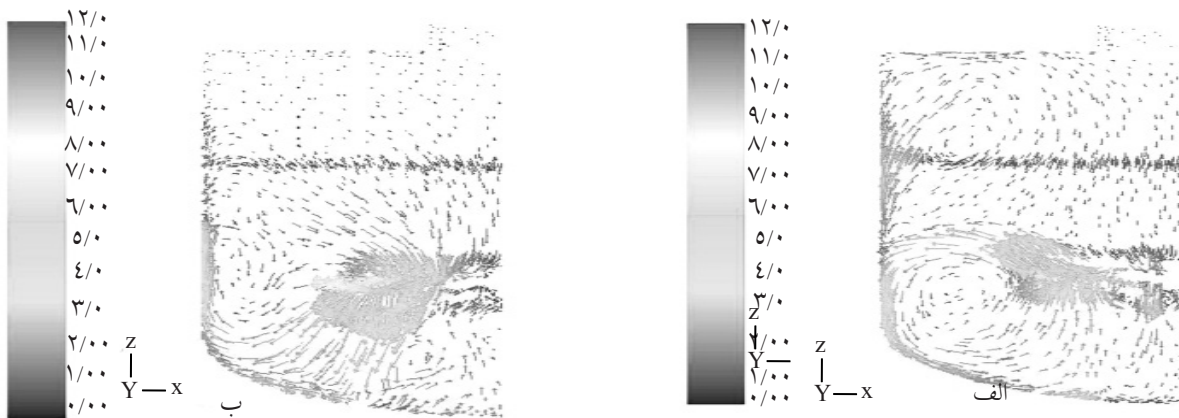
بالارونده و پایین رونده رسم شده است. همان گونه که مشاهده می شود در هر دو حالت با دور شدن از محور مرکزی مخزن، ابتدا سرعت افزایش یافته و با نزدیکی به دیواره ها کاهش می یابد. در مقطع فوقانی همزن، در کلیه فواصل شعاعی مقدار سرعت محوری برای حالت جریان بالارونده بیشتر از حالت جریان پایین رونده است. برعکس در مقطع تحتانی همزن، در کلیه فواصل شعاعی مقدار سرعت محوری برای حالت جریان بالارونده کمتر از حالت جریان پایین رونده است.

در صورت استفاده از همزن ساعت گرد، جریان گاز خروجی از اسپارجرهای هوا به دلیل حرکت بالارونده مایع به سمت بالا حرکت کرده و همراه جریان مایع یک مسیر حلقوی (گردابه چرخشی) را طی می کند. سپس به پایین همزن حرکت کرده و از آنجا به سمت بالای مخزن صعود می کند.

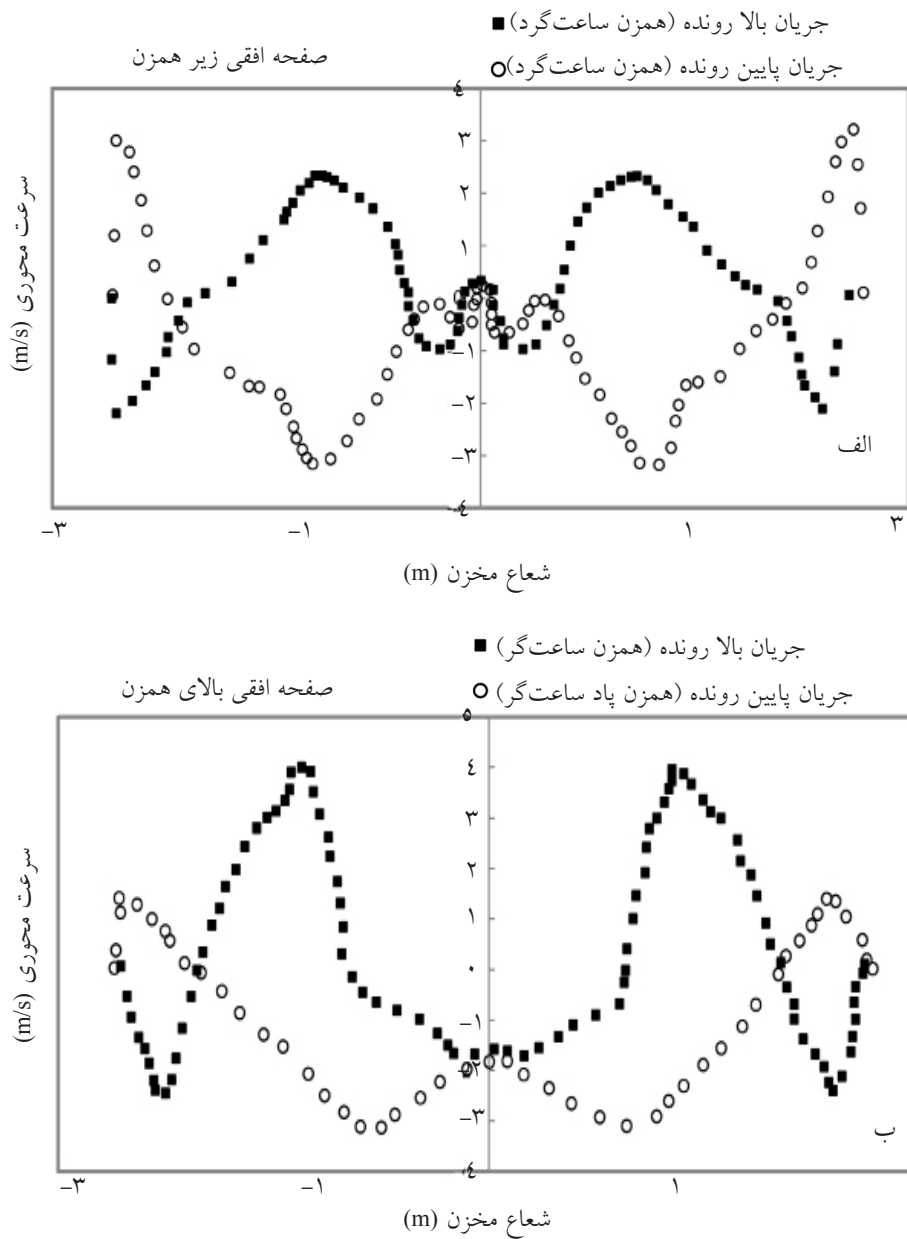
در شکل ۷ بردارهای سرعت در صفحه عمودی گذرنده از وسط پروانه ($y=0/0$) برای همزن بالارونده و پایین رونده در مخزن رسم شده است. همزن پادساعت گرد جریان مایع را از مرکز به سمت پایین مخزن حرکت داده و تنها یک گردابه چرخشی در زیر همزن ایجاد می کند. در مقابل همزن ساعت گرد جریان مایع را از مرکز به سمت بالای مخزن، به سمت سطح آزاد حرکت داده و یک گردابه چرخشی در بالای همزن ایجاد می نماید.

بنابراین، طول مسیر حرکت مایع و تعداد تغییرات جهت حرکت مایع، برای همزن با جریان بالارونده در مقایسه با همزن با جریان پایین رونده بیشتر است. لذا برای این همزن، بیشتر انرژی همزن صرف حرکت سیال شده و مقدار کمی از آن صرف اختلاط فازها می شود.

در شکل ۸ نمودار تغییرات سرعت محوری مخلوط فازها در دو مقطع افقی در بالا و پایین همزن برای دو جریان



شکل ۷ - بردارهای سرعت (m/s) فاز گاز در صفحه عمودی گذرنده از وسط همزن: (الف) جریان بالارونده (ب) جریان پایین رونده

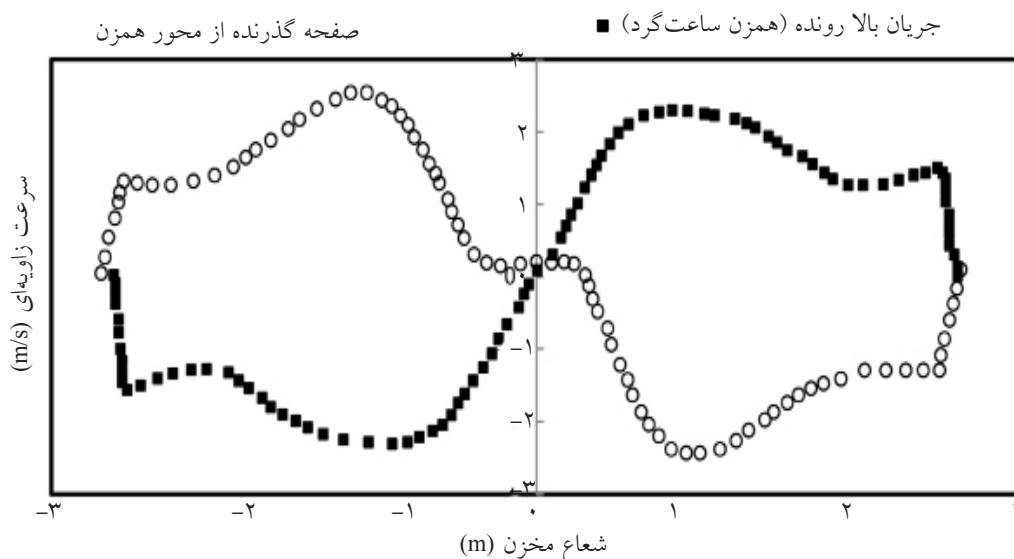


شکل ۸ - سرعت محوری در راستای شعاع مخزن در دو صفحه افقی در بالا و پایین همزن (الف) زیر همزن ($z=0.0\text{ m}$) و (ب) بالای همزن ($z=0.9\text{ m}$)

خواهد بود که به معنی ماندگی بیشتر جریان گاز در این منطقه است.

در شکل ۹ نیز نحوه تغییرات سرعت زاویه‌ای مخلوط فازها بر حسب تغییرات شعاع مخزن نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در هر دو حالت با فاصله گرفتن از محور مخزن سرعت ابتدا افزایش و سپس کاهش می‌یابد. از آنجا که جهت حرکت سیال در دو حالت مخالف همدیگر است، علامت سرعت برای این دو حالت متفاوت خواهد بود.

در حالی که در شبیه‌سازی جریان همزن پادساعت‌گرد، حباب‌های گاز در اثر حرکت پایین رونده مایع به سمت پایین حرکت کرده و از آنجا به سمت بالای مخزن می‌رود. بنابراین طول مسیر حرکت فاز گاز در حالت جریان بالارونده بیشتر است. به این معنا که زمان ماند حباب‌های گاز در سیستم بیشتر می‌باشد. از طرف دیگر نباید فراموش کرد که در صورت استفاده از همزن پادساعت‌گرد (جریان پایین رونده)، به دلیل انحناء دار بودن کف مخزن، تجمع فاز گاز در نواحی نزدیک محور همزن (مرکز مخزن) بیشتر

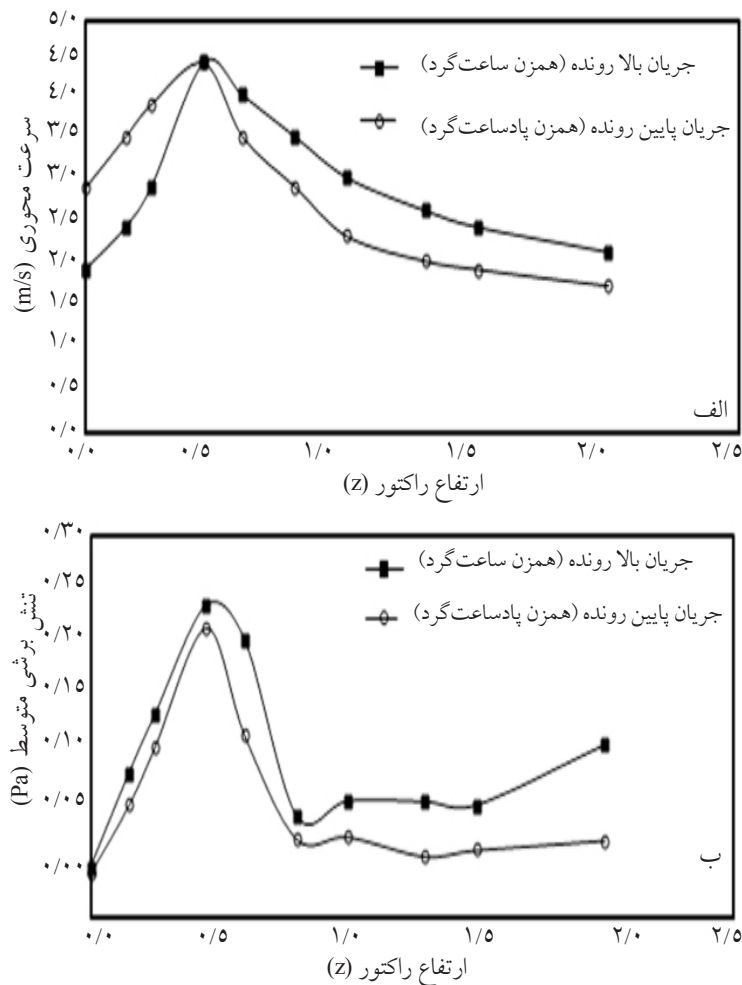


شکل ۹- سرعت زاویه‌ای در راستای شعاع مخزن در ارتفاع $z=1.5$ m

زیر همزن در حالتی که جریان پایین رونده است، بیشتر می‌باشد و برای مقاطع بالای همزن برای جریان بالا رونده بیشتر است. مطابق شکل دیده می‌شود که در نقاط نزدیک همزن، تنش برشی میانگین برای هر دو حالت جریان تقریباً به هم نزدیک است. اما در ارتفاع‌های دور از همزن، این کمیت برای همزن با جریان بالارونده بیشتر می‌باشد. به عبارت دیگر همزن با جریان بالارونده باعث افزایش تنش برشی متوسط در سطوح بالاتر راکتور شده و سبب می‌گردد که شدت اختلاط در بالای راکتور بیشتر شود. مطابق شکل در جریان پایین رونده اختلاط در قسمت زیرین همزن بهتر از جریان بالارونده انجام می‌شود.

یعنی جایی که سرعت بالارونده مثبت است، سرعت پایین رونده منفی است و بر عکس. اما روند تغییرات سرعت زاویه‌ای برای دو حالت، مشابه یکدیگر است و این به معنای آن است که دو همزن (جریان بالارونده و پایین رونده) از نظر میزان چرخش زاویه‌ای رفتاری مشابه هم دارند. برای مقایسه تغییرات سرعت و تنش برشی متوسط در جهت محوری متوسط وزنی- سطحی مقادیر سرعت و تنش برشی بر روی سطوح افقی در ده ارتفاع مختلف محاسبه و نتایج در شکل ۱۰ درج شده است.

همان‌گونه که در شکل ۱۰ مشاهده می‌شود، متوسط سرعت کل در ارتفاع‌های مختلف مخزن، برای مقاطع



شکل ۱۰- الف) سرعت محوری و (ب) تنش برشی متوسط در جهت ارتفاع راکتور

بیشتر است بنابراین زمان ماند حباب‌های گاز در سیستم بیشتر می‌باشد. لذا در این حالت زمان برای انجام پدیده‌های انتقال جرم، حرارت و مومنتوم بیشتر می‌باشد. در صورت استفاده از همزن پادساعت‌گرد (جریان پایین رونده)، به دلیل انحناء دار بودن کف مخزن، تجمع فاز گاز در نواحی نزدیک محور همزن (مرکز مخزن) بیشتر خواهد بود که به معنی ماندگی بیشتر جریان گاز در این منطقه می‌باشد.

همزن با جریان بالارونده باعث افزایش تنش برشی متوسط در سطوح بالاتر راکتور شده و سبب افزایش شدت اختلاط در بالای راکتور می‌گردد.

قدردانی و تشکر

بدین‌وسیله از حمایت مالی شرکت پتروشیمی شهید تندگویان جهت انجام مطالعه حاضر تشکر می‌شود.

نتیجه‌گیری

در این کار، یک مخزن حبابی-دوغایی همزن‌دار دوفازی با رویکرد اولرین-اولرین و مدل اغتشاش RNG k-ε توسط نرم‌افزار Fluent 6.3.26 شبیه‌سازی شد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان داد:

در حالت جریان پایین رونده، به دلیل این که جهت چرخش همزن خلاف جهت ورود گاز است، عملاً جریان مایع، گاز خروجی از اسپارجرها را در خلاف جهت خروجی منحرف کرده و جریان گاز را به مرکز راکتور هدایت می‌نماید. طول مسیر حرکت مایع و تعداد تغییرات جهت حرکت مایع، برای همزن با جریان بالا رونده در مقایسه با همزن با جریان پایین رونده بیشتر است. لذا برای این همزن، بیشتر انرژی همزن صرف حرکت سیال شده و مقدار کمی از آن صرف اختلاط می‌شود.

طول مسیر حرکت فاز گاز در حالت جریان بالا رونده

مراجع

- [1]. Schallenberg J., En J. H. and Hempel D. C., "The important role of local dispersed phase hold-ups for the calculation of three-phase bubble columns", *Chemical Engineering Science* 60, pp. 6027–6033, 2005.
- [2]. Swart J. W. A. and Krishna R., "Simulation of the transient and steady state behavior of a bubble column slurry reactor for Fischer–Tropsch synthesis", *Chemical Engineering and Processing* 41, pp. 35–47, 2002.
- [3]. Nigam K. D. P. and Schumpe A., *Three-phase sparged reactors*, Gordon and Breach Science Publishers, 1996.
- [4]. Murthy B. N., Ghadge R. S. and Joshi J. B., "CFD simulations of gas–liquid–solid stirred reactor: Prediction of critical impeller speed for solid suspension", *Chemical Engineering Science* 62, pp. 7184–7195, 2007.
- [5]. Panneerselvam R. and Savithri Surender S., G. D., "CFD simulation of hydrodynamics of gas-liquid-solid fluidised bed reactor", *Chemical Engineering Science* 64, pp. 1119–1135, 2009.
- [6]. Grevskott S., Sanns B. H., Dudukovic M. P., Hjarbo K. W. and Svendsen H. F., "Liquid circulation, bubble size distributions, and solids movement in two-and three-phase bubble columns", *Chemical Engineering Science* 51, 1703–1713, 1996.
- [7]. Mitra-Majumdar D., Farouk B. and Shah Y. T., "Hydrodynamic modeling of three-phase flows through a vertical column", *Chemical Engineering Science* 52, pp. 4485–4497, 1997.
- [8]. Jianping W. and Shonglin X., "Local hydrodynamics in a gas–liquid–solid three-phase bubble column reactor", *Chemical Engineering Journal* 70, pp. 81–84, 1998.
- [9]. Matonis D., Gidaspow D. and Bahary M., "CFD simulation of flow and turbulence in a slurry bubble column", *A.I.Ch.E. Journal* 48, pp. 1413–1429, 2002.
- [10]. Feng W., Wen J., Fan J., Yuan Q., Jia X. and Sun Y., "Local hydrodynamics of gas–liquid–nanoparticles three-phase fluidization", *Chemical Engineering Science* 60, pp. 6887–6898, 2005.
- [11]. Zhang X. and Ahmadi G., "Eulerian–Lagrangian simulations of liquid–gas–solid flows in three-phase slurry reactors", *Chemical Engineering Science* 60, 5089–5104, 2005.
- [12]. Ljungqvist M. and Rasmuson A., "Numerical simulation of the two phase flow in an axially stirred reactor", *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 79, 533, 2001.
- [13]. Montante G., Micale G., Magelli F., and Brucato A., "Experiments and CFD predictions of solid particle distribution in a vessel agitated with four pitched blade turbines", *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 71, 1005–1010, 2001.
- [14]. Khopkar A. R., Rammohan A. R., Ranade V. V. and Dudukovic M. P., "Gas–liquid flow generated by a Rushton turbine in stirred vessel: CARPT/CT measurement and CFD simulations". *Chemical Engineering Science* 60, 2215, 2005.
- [15]. Versteeg H. K. and Malalasekera, W., *An introduction to computational fluid dynamics, The finite volume method*, Longman Science & Technical, England -> 15, 1995
- [16]. FLUENT 6.1, User's Manual to FLUENT 6.1, Fluent Inc., Centerra Resource Park, 10 Cavendish Court, Lebanon, USA, 2005.
- [17]. Spalart P. and Allmaras S., *A one-equation turbulence model for aerodynamic flows*, Technical Report AIAA 92-0439, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1992.
- [18]. Aubin J., Le Sauze N., Bertrand J., Fletcher D. F. and Xuereb C., "PIV measurements of flow in an aerated tank stirred by a down-and an up-pumping axial flow impeller", *Experimental Thermal and Fluid Science* 28, pp. 447–456, 2004.