

شبیه سازی عددی گاز-جامد لیتیوم تیتانیوم در بستر سیال با نرم افزار MFIX و ارزیابی اثرات فشار، اندازه ذرات و سرعت گاز ورودی بر عملکرد آن

لاله رضائیان^{1*}، ناصر ثقه‌الاسلامی^۲

۱- لاله رضائیان، کارشناسی ارشد، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

۲- دکتر ناصر ثقه‌الاسلامی، گروه نفت موسسه آموزش عالی اقبال لاهوری، مشهد، ایران

چکیده

جدایش ذرات در بسترهای سیال گاز-جامد به دلیل تفاوت در اندازه‌شان پدیده‌ای متداول در بسترهای سیالی گاز-جامد است. جدایش ذرات بر بازده انتقال حرارت و انتقال جرم بستر سیالی شده تاثیر می‌گذارد. در راکتورهای بستر سیالی که در آنها یک واکنش گرماده رخ می‌دهد، به منظور حذف مناطق گرم^۳ و حذف کاهش کیفیت محصولات، ایجاد اختلاط مناسب در بستر الزامی است. از طرفی دیگر، پدیده جدایش برای فرایندهایی که شامل جداسازی ذرات هستند، الزامی است. از طرفی دیگر اکثر بسترهای سیال شده گاز جامد در فشارهای بالا کار می‌کنند لذا ضروری است پدیده اختلاط و جدایش در فشارهای بالا برای این بسترها پیش‌بینی شود. در این مقاله از نرم‌افزار MFIX^۴ استفاده شد تا تاثیر فشار، اندازه ذرات و سرعت ورودی گاز بر روی پارامترهای اختلاط و جدایش ذرات در بستر مشخص شود. نتایج ارائه شده نشان می‌دهد که از دینامیک سیالات محاسباتی می‌توان به عنوان یک ابزار تحقیقاتی جهت تخمین پارامترهای موثر در عملکرد بسترهای سیال شده استفاده نمود.

¹ Corresponding author: Email: lalehrezaeian@gmail.com

² Corresponding author: Email: slami@um.ac.ir

³ Hot spots

⁴ Multiphase flow with interphase exchanges

کلمات کلیدی: بستر سیال گاز-جامد، پدیده‌های جدایش و اختلاط ذرات، نرم‌افزار MFIX

۱- مقدمه

جدایش به عنوان رفتار توده حاصل نیروهای جاذبه میان ذرات تک و نیروی بین ذره و گاز است. بنابراین آنالیز پدیده‌های جدایش و اختلاط در اندازه ذرات بر اساس اطلاعاتی از قبیل مسیر حرکت و نیروهای وارد بر تک ذرات انجام می‌شود. سیالیت گازی شامل ذرات جدا از هم و فاز پیوسته گازی است که دارای فرایند دینامیکی بسیار پیچیده می‌باشد. با سطح پیشرفت کنونی انجام آزمایشات کافی و تولید داده‌های غنی در مقیاس ذرات امکان‌پذیر نیست. حرکت بالارونده حباب‌ها از میان بستر سیال شده جامد، منجر به اختلاط و جدایش ذرات بستر از هم می‌شود. زمانی که حباب از میان بستر بالا می‌رود، ذرات جامد به داخل ناحیه ساکن دنباله حباب کشیده می‌شوند. زمانی که ذرات از دنباله حباب به داخل بستر سقوط کرده و ذراتی جدید از ناحیه چگال اطراف به داخل دنباله کشیده می‌شوند، اختلاط محوری رخ می‌دهد. وقتی که حباب‌ها به سطح بستر می‌رسند متلاشی شده و ذرات همراه دنباله بر روی سطح فرو می‌ریزند. با چنین مکانیسمی ذرات ته بستر با ذرات بالای بستر مخلوط می‌شوند. حبابی که در بستر بالا می‌رود به هنگام حرکت، موجب ایجاد فضاهایی خالی در بستر می‌شود که این فضاهای خالی با ذراتی که در اطراف حباب به پایین می‌افتند، پر میشوند. اختلاط و جدایش پدیده‌های آبی هستند، و نتیجه تعادل برقرار شده در بستر، گرادیان غلظت در جهت محوری و توزیع ذرات یکنواخت در جهت شعاعی می‌باشد [۱]. در بسترهایی که توزیع اندازه ذرات وجود دارد جدایش ذرات به دلیل تفاوت در نیروی درگ بر واحد جرم ایجاد می‌شود [۲]. تعدادی مدل برای توصیف پدیده‌های اختلاط و جدایش را در بستر ارائه شده‌اند. تعدادی از این مدل‌ها غلظت‌های ذرات jetsam و floatsam را در شرایط پایدار بررسی می‌کنند. مدلی که توسط گیلیبارو و روا [۱] ارائه شد، نقطه شروعی در پیش‌بینی [۳-۸] پروفایل‌های غلظت در بسترهای سیالی حباب‌دار است. در این مدل، ذرات داخل بستر بین دو فاز توزیع می‌گردد؛ فاز توده، که شامل اکثر ذرات جامد و فاز دنباله که حاوی ذرات جامدی است که در دنباله حباب‌های بالارونده در بستر سیال شده هستند. همچنین در این مدل، ذرات موجود تنها از دو نوع flotsam و jetsam فرض می‌شوند. برای نوشتن موازنه جرم مکانیزم انتقال ذرات که عبارتند از: دوران^۵، تبادل^۶، اختلاط محوری و جدایش در نظر گرفته می‌شوند. در اینجا منظور از دوران، حرکت ذرات جامد از ته بستر به سطح آن توسط فاز دنباله است. مکانیزم تبادل حرکت ذرات جامد بین فاز توده و فاز دنباله متناسب با تفاوت غلظت بین دو فاز انجام می‌شود. اختلاط محوری به عنوان مکانیزم شبه نفوذ^۷ تعریف می‌شود. نامیر و همکارانش [۳] نتیجه گرفتند که این ترم را می‌توان از موازنه حذف کرد زیرا این مکانیزم در بسترهای سیالی از نظر فیزیکی مکانیزمی واقعی نیست.

⁵ Circulation

⁶ Exchange

⁷ Pseudo-diffusion

نهایتاً ترم جدایش برای تعریف جریان پایین‌رونده ذرات jetsam استفاده می‌شود. اهمیت این سه ترم در موازنه جرم وابسته به هیدرودینامیک حباب‌ها در بستر سیال شده می‌باشد. [۳]

۱-۱- تأثیر فشار

بسترهای سیالی که در فشارهای بالا عمل می‌کنند دارای یکسری مزایا از قبیل نرخ بالای انتقال حرارت [۹]، کم بودن جدایش ذرات [۱۰]، کوچک بودن اندازه تجهیزات و غیره هستند. فشار بالا منجر به افزایش چگالی گاز شده در نتیجه بر نیروهای بین ذرات و سیال و همچنین الگوهای جریان اثر می‌گذارد به این ترتیب بازده تماس گاز-جامد متفاوت از حالات با فشارهای معمولی می‌شود. از سال ۱۹۷۰ تحقیق بر روی بسترهای سیالی گاز-جامد که در فشارهای عملیاتی بالا کار می‌کنند، شروع شد. به عنوان نتیجه این تحقیقات می‌توان بیان کرد که بسترهای چگال، سیالیت آرامی^۸ با حباب‌های کوچک از خود نشان می‌دهند [۱۱-۱۳]. مطالعات آزمایشگاهی نشان داد که با افزایش فشار با وجود کاهش اندازه حباب‌ها، سرعت بالا رفتن، فرکانس، جزء حجمی متوسط حباب و نرخ برخورد افزایش می‌یابد [۱۴ و ۱۵]. همچنین مطالعات بر روی قسمت عرضی بستر سیالی نشان داد که جریان حباب در بعد محوری ستون متمرکز شده است [۱۶]. مشاهده شده است شکستن حباب‌ها در فشارهای بالا بیشتر اتفاق می‌افتد و این شکستن بیشتر در قسمت پایین حباب اتفاق می‌افتد [۱۷ و ۱۸]. همچنین گزارش شده است که در بسترهای سیالی گاز-جامد در فشارهای بالا بستر بیشتر انبساط یافته و رژیم جریان ذره‌دار^۹ در گستره‌ی بزرگتری رخ می‌دهد [۲۶-۱۱]. تأثیر فشار بر روی پارامترهای سیستم به غیر از سرعت حداقل سیالی شدن، در بستری با ذرات کوچکتر (گروه A) بیشتر از ذرات بزرگتر (گروه B و D) است [۱۲ و ۱۳]. برای ذرات گروه B تأثیر فشار بر روی رفتار حباب‌های گازی اندکی پیچیده‌تر است؛ در ابتدا تا فشار ۱۶ بار با افزایش فشار اندازه حباب بزرگتر می‌شود [۱۵، ۱۶، ۲۴ و ۲۵] سپس با افزایش بیشتر فشار کاهش می‌یابد. با استفاده از روش عکسبرداری X-ray، گیلبرتسون بر روی جنبه‌های مختلفی از هیدرودینامیک حباب‌های بستر از جمله تشکیل حباب، تشکیل ساختار، رشد و شکستن مطالعه کرد و تفاوت‌های اساسی در این موارد نسبت به فشار اتمسفری ثبت کرد.

۲- مکانیزم‌های پدیده جدایش

در مطالعات انجام شده، ۳ مکانیزم کاملاً متفاوت مؤثر در ایجاد حرکت نسبی ذرات در بستر یافت شده است. بالا بردن ذرات در دنباله یک حباب صعود کننده، علاوه بر اینکه به عنوان یک مکانیزم اختلاط برای ذرات می‌باشد، مهمترین مکانیزم جدایش ذرات نیز هست. در عمل تنها ذرات floatsam هستند که می‌توانند به قسمت بالاتر بستر انتقال یابند. برای ذرات بزرگتر و

^۸ Smoother fluidization

^۹ Particulate regime

سنگین تر یعنی jetsam، مهاجرت به سمت پایین از طریق ۲ مکانیزم روی می‌دهد. یکی از این ۲ مکانیزم که مهمترین نیز هست به این صورت می‌باشد که این ذرات با سقوط در میان حباب پایین می‌آیند، برای ذرات کوچکتر و چگالتز مهاجرت به سمت توزیع کننده به صورت عبور از فاصله‌ها و نفوذ در درزهای بین ذرات صورت می‌گیرد. مکانیزم دوم به این صورت است که نفوذ بین ذره‌ای فقط به ناحیه‌ای با عبور حباب مغشوش شده است، محدود می‌شود و تنها زمانی اتفاق می‌افتد که ذرات چگال و کوچک به اندازه کافی کوچک باشند. در تکمیل توضیحات مربوط به مکانیزم‌های پدیده جدایش یادآوری این نکته ضروری به نظر می‌رسد که دلیل اصلی پدیده جدایش وجود تفاوت بین نسبت نیروی درگ به وزن واحد برای ذرات مختلف است. به این ترتیب که ذراتی که نسبت نیروی درگ به وزن واحد بیشتری دارند، به سمت سطح بستر حرکت می‌کنند، در حالیکه ذراتی که این نسبت برایشان مقدار کوچکتری دارد به سمت توزیع کننده مهاجرت می‌نمایند.

۲-۱- عوامل موثر بر پدیده جدایش

فاکتورهای زیادی بر این پدیده پیچیده تأثیرگذار می‌باشند از قبیل: فشار، نسبت چگالی بین ذرات، نسبت اندازه، شکل ذرات (در مواردی که ذرات به شکل بشقابی هستند اهمیت پیدا می‌کند)، حداقل سرعت سیالی شدن، توزیع گاز سیال کننده، نسبت ارتفاع به قطر بستر (وقتی که مقداری کمتر از ۰٫۸ باشد) تأثیرگذار خواهد بود. WU در سال ۱۹۹۸ این موضوع را مطرح کرد که اگر نسبت طول به قطر بستر کم باشد پدیده جدایش شدیدتر خواهد بود. با افزایش نسبت سایز یا نسبت چگالی ذرات و یا کاهش فشار عملیاتی، تمایل به جدایش ذرات در بستر افزایش می‌یابد [۳۲].

۲-۲- تعریف شاخص جدایش

برای توصیف درست و بهتر نحوه توزیع ذرات در بستری که جدایش در آن رخ داده است، دو آرایه‌ی شاخص اختلاط و شاخص جدایش تعریف می‌شود. اگر انتظار اختلاط بیشتر از جدایش باشد، استفاده از شاخص اختلاط مناسب‌تر است در غیر این صورت از شاخص جدایش استفاده می‌شود. برای یک سیستم ۲ تایی، روه و همکارانش در سال ۱۹۷۲، رابطه $M = \frac{(X_J)u}{\bar{X}_J}$ برای شاخص اختلاط مطرح کردند [۳۳]. در این رابطه $(X_J)_u$ کسر ذره jetsam در بخش بالای بستر و \bar{X}_J جزء ذره jetsam در حالت اختلاط کامل می‌باشد. $(X_J)_u$ و \bar{X}_J به صورت جزء جرمی بیان می‌شوند. برای حالتی که اختلاط کامل در بستر وجود داشته باشد، $M=1$ و در صورت جدایش کامل، ذرات jetsam در پایین بستر تجمع می‌یابند و $M=0$ می‌باشد. در سال ۱۹۸۲، چیبا و همکارانش شاخص جدایش را برای یک سیستم ۲ تایی به صورت زیر تعریف کردند [۳۴]:

$$S = \frac{(X_f)u}{\bar{X}_f} \quad (1)$$

که در آن $(X_f)_u$ جزء وزنی floatsam در قسمت بالای بستر و \bar{X}_f جزء وزنی floatsam در شرایط اختلاط کامل می‌باشد. اگر $S=1$ باشد به معنی جدایش کامل و $S=0$ بیان‌گر اختلاط کامل است. برای یک سیستم دوتایی ارتباط بین این دو شاخص به صورت زیر می‌باشد.

$$\bar{X}_f = 1 - \bar{X}_j \quad \rightarrow \quad M = \frac{1-S\bar{X}_f}{1-\bar{X}_f} = S + \frac{1-S}{\bar{X}_j} \quad (2)$$

۲-۳- بررسی پدیده جدایش در بستر

برای بررسی میزان جدایش ذرات در بستر از رابطه‌ای که در سال ۲۰۰۳، گلدشمیت برای بررسی جدایش در یک بستر دو-تایی ارائه داد [۳۵]، استفاده شده است.

$$S = \frac{S-1}{S_{max}-1} = \frac{\frac{h_{small}-1}{h_{large}}}{\frac{2-x_{small}-1}{1-x_{small}}} \quad (3)$$

در رابطه فوق h_{small} و h_{large} به ترتیب عبارتند از ارتفاع متوسطی که ذرات کوچک و بزرگ در بستر به دلیل حضور گاز در بستر پیدا می‌کنند. برای این منظور مجموع ارتفاع هر سلول از بستر ضربدر حجمی از بستر که توسط ذره بزرگ / کوچک اشغال شده است بر مجموع حجمی از بستر که توسط ذره بزرگ / کوچک اشغال شده است، تقسیم می‌گردد.

$$h_{small(large)} = \frac{\sum_{i=1}^M h_i ep_{small(large)_i}}{\sum_{i=1}^M ep_{small(large)_i}} \quad (4)$$

$$\begin{cases} M = \text{total cells of bed} \\ i = \text{number of cell} \end{cases} \quad (5)$$

اگر عددی که برای S طبق روابط فوق بدست آمد را برحسب زمان رسم کنیم، زمان رسیدن به جدایش کامل و مقدار آن برای بستر بدست می‌آید. همچنین با مقایسه این مقادیر در شرایط عملیاتی مختلف تأثیر پارامترهای فشار، اندازه ذرات و سرعت گاز بر جدایش ذراتی با چگالی یکسان در یک بستر سیالی شده مشخص می‌گردد. برای بستر بررسی شده، $x_{small} = 0,5$ می‌باشد زیرا درصد حجمی یکسان از دو ذره با چگالی یکسان در بستر حضور دارند. روند ذکر شده در بالا که عبارتست از محاسبه h_{small} و h_{large} و سپس S برای بستر که در شرایط مختلف فشار، اندازه ذرات و سرعت گاز قرار دارد، در زمان‌های مختلف طی، نحوه تغییرات S با زمان ثابت و تأثیر پارامترهای مختلف بررسی گردید. همچنین در شرایط مختلف الگوی

جدایش در بستر نیز بدست آمد. برای این منظور در ارتفاع‌های خاصی از بستر جزء جرمی متوسطی برای ذره کوچکتر از داده‌هایی که توسط MFIX تولید شده بود، بدست آمد.

۳- روش عددی

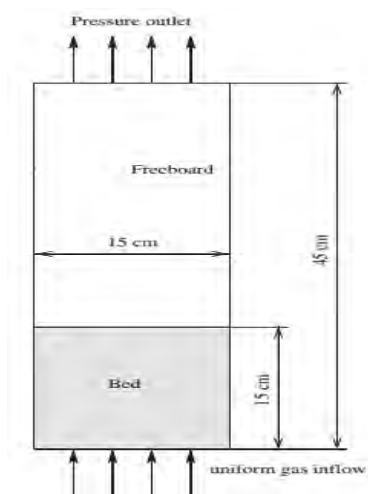
۳-۱ نرم‌افزار MFIX

نرم‌افزار MFIX، نرم‌افزاری است که هدف کلی آن شبیه‌سازی هیدرودینامیک به منظور توصیف واکنش‌های شیمیایی و انتقال حرارت در جریان‌های گاز-جامد، متراکم یا رقیق می‌باشد که این نوع جریان‌ها معمولاً در راکتورهای تبدیل انرژی و فرایندهای شیمیایی اتفاق می‌افتند [۱۷]. این نرم‌افزار در آزمایشگاه ملی فن‌آوری انرژی آمریکا به زبان فرترن نوشته شده و قابلیت‌های شبیه‌سازی سیستم‌هایی با ذرات مختلف، سیستم‌های مختصات کارتیزین و استوانه‌ای دو و سه بعدی، سیستم‌هایی شامل انتقال حرارت و انتقال جرم را دارا می‌باشد. MFIX اطلاعات مربوط به فشار، دما، ترکیب درصد و توزیع سرعت سیستم را به عنوان خروجی و به صورت تابعی از زمان ارائه می‌دهد. در سال ۱۹۹۶ به منظور بالا بردن صحت محاسبات و سرعت اجرای برنامه و شبیه‌سازی بستر سیال حبابی شروع به استفاده از کد MFIX نمودند و به منظور بهبود سرعت، الگوریتم ضمنی (روش‌های عددی با طرح کردن روش شبه ضمنی و تنظیم اتوماتیکی زمان) را جایگزین الگوریتم‌های قدیمی نمودند. در تست‌هایی که برای بررسی الگوریتم جدید صورت گرفته مشخص شده است که سرعت اجرای برنامه‌ها ۳ تا ۳۰ مرتبه سریعتر از الگوریتم سابق می‌باشد. با اطلاعات به دست آمده از این کد مهندسان می‌توانند شرایط درون راکتورها و رفتار پارامتری آن‌ها را مورد مطالعه قرار داده و اطلاعاتی برای طراحی راکتورهای چندفازی به دست آورند. [۲۷] سالها محققین (لاکس و جانسن در سال ۱۹۹۷ و فاگت و پریس در سال ۱۹۹۴ و اسپالدینگ در سال ۱۹۸۰)، در جهت بهبود این کد مطالعات انجام داده و از آن استفاده کرده‌اند، تا این کد به عنوان یک کد تجاری CFD انتخاب شد. اساس تئوری و عددی کد MFIX بر مبنای تئوری هیدرودینامیکی سیالیت است، و محققین بسیاری (دیویدسن ۱۹۶۱ و دیویدسون و هریسن ۱۹۶۳ و جکسون سال ۱۹۷۰ و غیره) در جهت پیشرفت و کاربرد مدل هیدرودینامیکی این کد برای سیالیت مطالعات انجام دادند. در مطالعات صورت گرفته از مدل هیدرودینامیکی برای مطالعه پایداری سیالیت و کشف جزئیات حرکت حباب‌ها استفاده نمودند. معادلات حاکم در این کد نیز در ادامه ارائه خواهد شد. برای تسریع این کد، از روش‌های عددی با طرح کردن روش شبه‌ضمنی و تنظیم اتوماتیکی زمان، استفاده می‌کنند. کد MFIX یک سری محدودیت‌هایی نیز دارد، درستی پیش‌بینی این مدل ممکن است به دلایل گوناگون مثل، ناقص بودن معادلات حاکم، ناکافی بودن اطلاعات نسبت مواد ترکیب‌شونده، اطلاعات ناقص

از شرایط مرزی و اولیه و... محدود باشد. یا اینکه کاربران به شبیه‌سازی و آنالیز نتایج آن مسلط نباشند. برای توضیح تئوری این مدل هیدرودینامیکی از یک سری، معادلات حاکم، نسبت مواد ترکیب‌شونده، شرایط مرزی و اولیه، استفاده میشود. [۲۷]

۳-۲- هندسه مورد مطالعه

هندسه مورد مطالعه با توجه به مقاله [۳۰] انتخاب شد. نمایی از بستر سیال در شکل (۱) نشان داده شده است. ستونی با ابعاد $45 \times 15 \text{ cm}$ ، را برای بستر انتخاب می‌کنیم. البته این ابعاد در حین بررسی‌ها به دلیل شرایط ایجاد شده در فشارهای بالا (با ادامه روندی که برای فشارهای پایین‌تر مطرح کردیم، متوجه شدیم که برای فشار ۱۰ بار نمی‌توان همانند فشارهای پایین بررسی‌ها را ادامه دهیم زیرا میزان ذرات حمل شده توسط گاز به شدت افزایش می‌یابد و با بزرگتر کردن طول ناحیه free board به ۹۰ سانتی‌متر نیز این مشکل رفع نشد به ناچار اختلاف سرعت‌های گاز ورودی و حداقل سرعت سیالی شدن که در حالات قبلی ۲۰، ۴۰ و ۶۰ سانتی‌متر بر ثانیه بود را به مقادیر ۵، ۱۵ و ۲۰ سانتی‌متر بر ثانیه تغییر دادیم. همچنین ابعاد free board به $30 \times 15 \text{ cm}$ ، تغییر می‌یابد.



شکل ۱: نمایی از بستر سیال [۳۰]

۳-۳- شرایط مرزی و اولیه

شرط اولیه: در تمام شبیه‌سازی‌ها، حدس اولیه برای تمام سلول‌های محاسباتی در نظر گرفته و کسر حجمی اولیه جامد را به صورت دستی به فایل mfix.dat معرفی می‌کنیم.

شرط مرزی: شرط مرزی ورودی سرعت^{۱۰} با توزیع یکنواخت جریان گاز برای شرط مرزی انتهایی پایینی بستر سیال قرار داده شد. این شرط مرزی به Dirichlet معروف است. برای فاز جامد، سرعت ورودی صفر در نظر گرفته شد. در قسمت خروجی بستر

¹⁰ Velocity inlet

(قسمت انتهایی بالای بستر)، از شرط مرزی خروجی فشار^{۱۱} برای مخلوط جریان دوفازی استفاده شد. مقدار فشار خروجی، فشار اتمسفری است. می‌توان گفت شرط مرزی خروجی معادل شرط مرزی Neumann برای سرعت گاز است که در آن فرض می‌شود مشتق سرعت گاز در راستای افقی صفر است. بنابراین فرض می‌کنیم که ارتفاع بستر به اندازه کافی بزرگ هست که جریان سیال در قسمت freeboard کاملاً توسعه یافته باشد. شرط مرزی دیواره‌ها: برای فاز گاز در سطح دیوار، شرط مرزی عدم لغزش^{۱۲} با سرعت صفر دیواره در نظر گرفته شد. اما چنین فرضی برای فاز جامد درست نیست. زمانی که ذرات جامد به دیواره برخورد می‌کنند، می‌توانند روی سطح دیواره بلغزند. بنابراین می‌توان فرض نمود که سرعت عمودی ذرات جامد در دیواره صفر است و سرعت مماسی ذرات جامد از شرط لغزش آزادانه^{۱۳} پیروی می‌کند. بنابراین از شرط مرزی عدم لغزش برای فاز گاز و از شرط مرزی لغزش آزادانه برای ذرات جامد در دیواره استفاده شد.

۳-۴- شرایط عملیاتی مورد بررسی

برای بررسی پدیده جدایش برای بستر سیالی شده در فشارهای بالا از بستری با مشخصات زیر استفاده شد. گاز: هوا که در شرایط اتمسفریک دارای چگالی $\rho_{air} = 1.2 \times 10^{-3} \frac{gr}{cm^3}$ می‌باشد. جامدات: در این پروژه دو ذره جامد لیتیم و تیتانیم را به دلیل خصوصیات مناسب لیتیم تیتانات، از جمله پایداری حرارتی و شیمیایی بسیار خوب مورد بررسی قرار داده‌ایم، اما از آن جهت که در اینجا ما به بررسی تاثیرات نسبت اندازه ذرات می‌پردازیم و همچنین در این کد تنها یکی از دو مورد دانسیته و نسبت اندازه ذرات می‌تواند متغیر باشد، ما از میانگین دانسیته دو ذره جامد استفاده کرده‌ایم. [۳۱] (دانسیته لیتیم $0.534 \frac{gr}{cm^3}$ و دانسیته تیتانیم برابر $4.506 \frac{gr}{cm^3}$ ، می‌باشد).

$$\rho_{s1} = 2.52 \frac{gr}{cm^3}, \quad d_1 = 1.5 \text{ mm}$$

$$\rho_{s2} = 2.52 \frac{gr}{cm^3}, \quad d_2 = 2.25, 3.75, 5.25 \text{ mm} \quad [۵۸]$$

۴- نتایج و بحث

۴-۱- افت فشار در بستر

با بررسی داده‌های حاصل از بررسی بستر معلوم می‌شود که با افزایش فشار بالای بستر و نسبت قطر ذره بزرگ به ذره کوچک، افت فشار گاز در بستر افزایش یافته است. افزایش افت فشار گاز در بستر به معنی افزایش نیروی درگ وارده از سوی گاز به ذرات بستر می‌باشد این در حالی است که وزن ذرات در شرایط مختلف در بستر ثابت می‌باشد. بنابراین با افزایش نیروی درگ

¹¹ Pressure outlet

¹² No-slip boundary condition

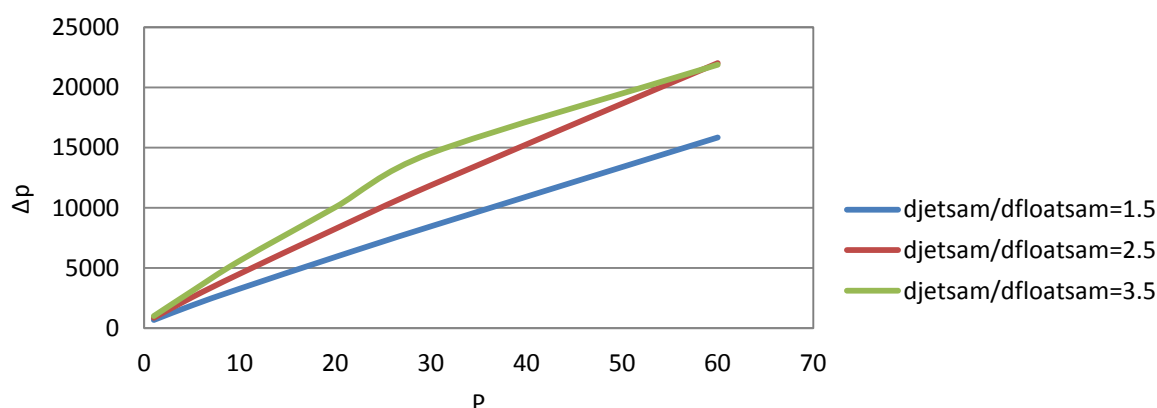
¹³ Free-slip

سریعاً به نیروی وزن ذرات غلبه شده و حالت سیالی شدن در سرعت‌های پایینی از گاز ایجاد می‌شود. در جدول زیر برای نمونه مقادیر ΔP بستر در سرعت انتخابی $u_0 = 10 \text{ cm/s}$ در فشارهای مختلف بالای بستر آورده شده است.

جدول ۱: مقادیر افت فشار بستر در فشارهای عملیاتی و نسبت اندازه ذرات متفاوت

$d_{jetsam}/d_{floatsam}$	$d_{jetsam}/d_{floatsam}$	$d_{jetsam}/d_{floatsam}$	P
= 1.5	= 2.5	= 3.5	
$\Delta p = 684.97 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 865.283 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 1011.27 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	1bar
$\Delta p = 1899 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 2570.825 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 3082.6 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	5bar
$\Delta p = 3287 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 4524.1 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 5610.7 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	10bar
$\Delta p = 5917.4 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 8253.2 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 10049.2 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	20bar
$\Delta p = 8462 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 11870.4 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 14536.8 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	30bar
$\Delta p = 15836 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 22016.4 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	$\Delta p = 21877.4 \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$	60bar

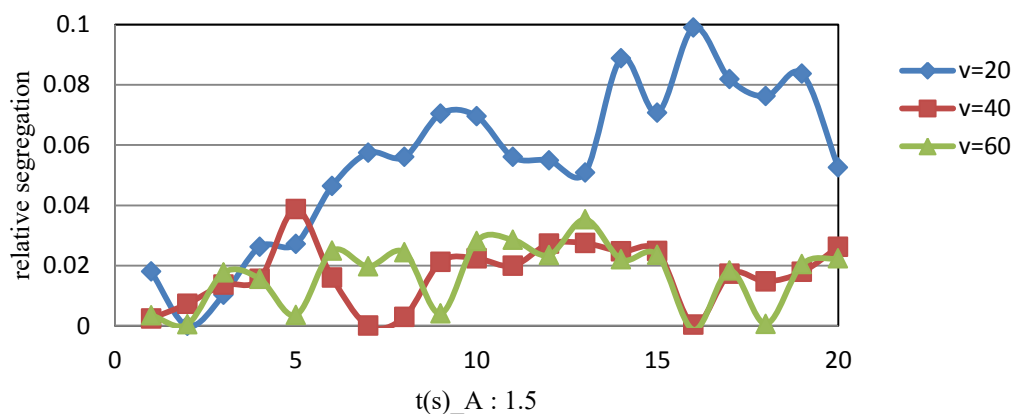
داده‌های جدول (۱) به صورت گراف نیز در شکل (۲) نشان داده شده است. محور افقی این نمودار بیانگر فشارهای مختلف و محور عمودی مقادیر افت فشار گاز در بستر در فشارهای مختلف است.

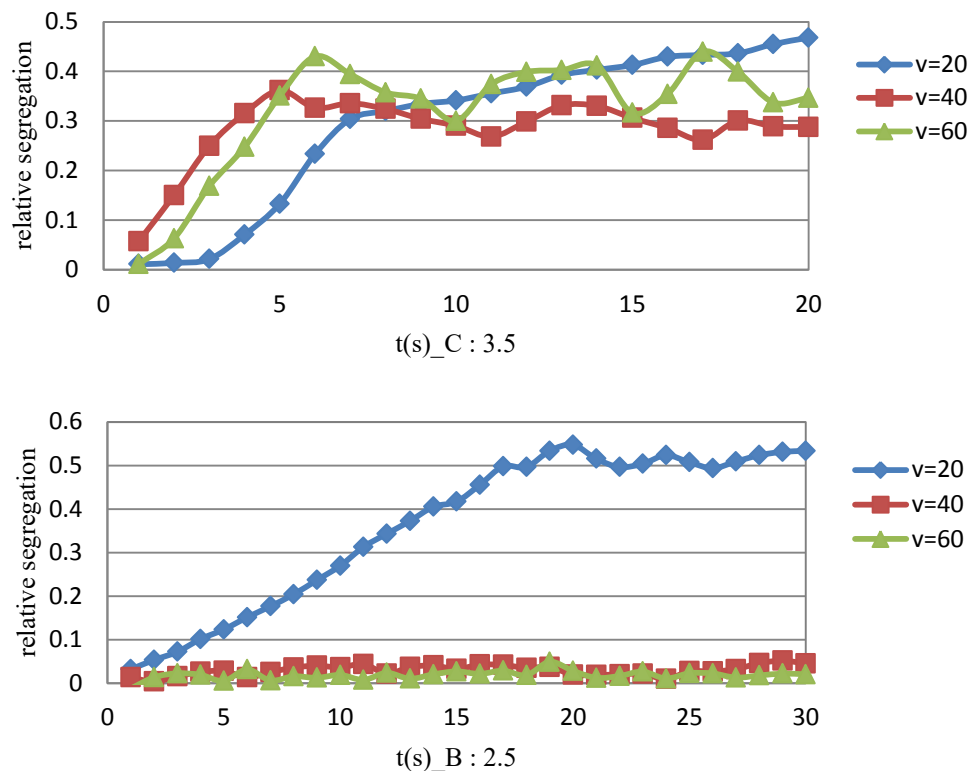


شکل ۲: تغییرات افت فشار بر حسب فشار عملیاتی در نسبت اندازه ذرات مختلف در سرعت گاز ورودی

۱۰ cm/s

همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش فشار بالای بستر و نسبت اندازه ذرات، افت فشار بستر افزایش می‌یابد که این امر باعث کاهش حداقل سرعت سیالی شدن ذرات بستر می‌باشد. ذکر دو نکته در اینجا مهم به نظر می‌رسد: اول اینکه در فشار-های مختلف چگالی گاز ثابت نیست. در شروع کار در هر فشار باید مقادیر مناسب چگالی جایگذاری شود. برای سادگی کار فرض می‌شود که گاز از قانون گازهای ایده‌آل تبعیت کند البته با توجه به فشارهای عملیاتی فرض معقولی می‌باشد. نکته دوم اینکه در وارد کردن مقدار فشارها باید دقت کرد چون فشارهای بالای بستر در کد MFIX به صورت نسبی تعریف شده است. البته زمانی که بستر شامل ذراتی با اندازه متفاوت است سیالی شدن نسبی در سرعت‌های پایین گاز رخ می‌دهد. به این ترتیب که با افزایش u_0 ، ذرات کوچکتر به میان فضای خالی ذرات بزرگ‌تر سر می‌خورند و در این فضا سیالی می‌شوند در حالی که ذرات بزرگتر ساکن هستند. در این جا باید دقت شود که تغییر سرعت u_0 ، حالت اولیه بستر، حالت نهایی زمانی باشد که با سرعت قبلی گاز وارد بستر می‌شده است. به عبارت بهتر با استفاده از عبارت restart_1، تغییرات نهایی که در بستر در یک u_0 خاص بعد از اتمام ۱ ثانیه ایجاد می‌شود، نقطه شروع برای محاسبات در ۱ ثانیه بعدی با u_0 دیگری است. با استفاده از نرم‌افزار Paraview می‌توان رفتار بستر را برحسب سرعت‌های مختلف گاز مشاهده کرد و به این ترتیب با مشخص شدن سرعتی که بستر به حرکت درآمده است، u_{0mf} بدست می‌آید.





شکل ۳: تغییرات عدد جدایش در فشار ۱ بار و در نسبت اندازه ذرات (A: ۱,۵) و (B: ۲,۵) و (C: ۳,۵) بر

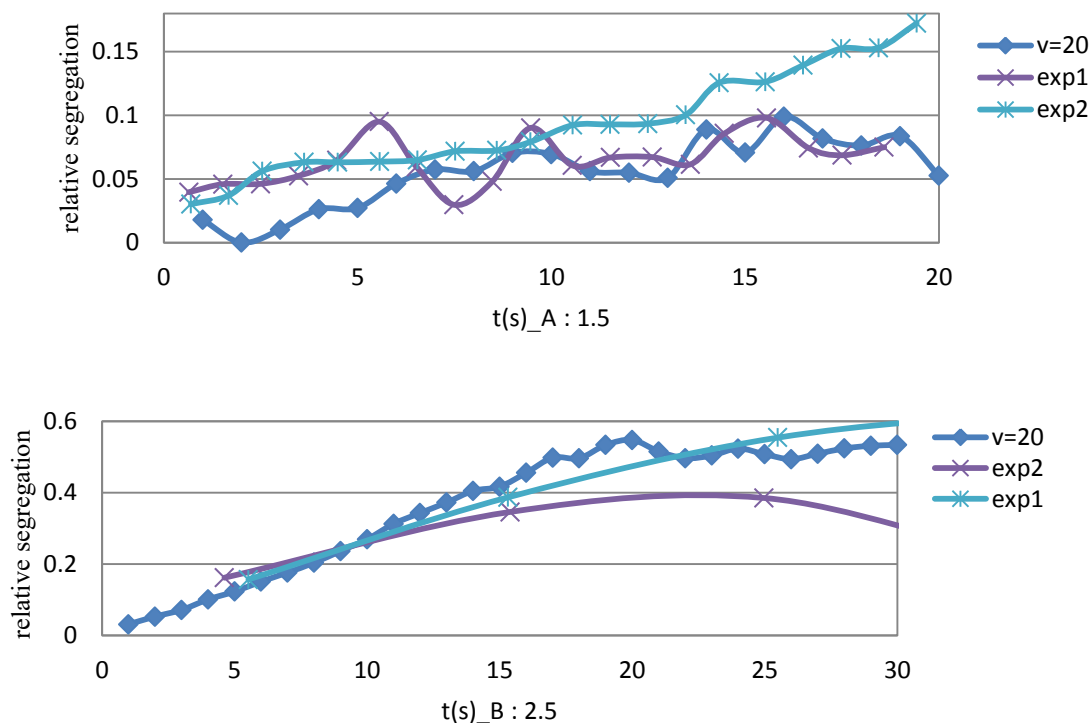
حسب زمان

همانطور که در شکل (A_۳) ملاحظه می‌گردد، برای سرعت $u_0 - u_{mf} = 20 \frac{cm}{s}$ ، بعد از گذشت ۲۰ ثانیه بستر به حالت پایدار در آمده و مقداری که برای پارامتر جدایش حاصل شده است، ۰,۰۹ می‌باشد که یک مقدار نزدیک به صفر به معنای اختلاط تقریباً کامل است که دلیل آن نزدیک بودن قطر ذرات به هم است. برای سرعت $u_0 - u_{mf} = 40 \frac{cm}{s}$ ، از همان ثانیه‌های اول، تعادل در بستر ایجاد شده و پارامتر جدایش به ۰,۰۲۵ می‌رسد که نشانگر وجود اختلاط کامل در بستر است و برای سرعت $u_0 - u_{mf} = 60 \frac{cm}{s}$ ، از همان ثانیه‌های اول، تعادل در بستر ایجاد شده و پارامتر جدایش به ۰,۰۱۵ می‌رسد که نشانگر وجود اختلاط کامل در بستر است. همانطور که در شکل (B_۳) مشخص است، در سرعت $u_0 - u_{mf} = 20 \frac{cm}{s}$ ، بعد از گذشت ۳۰ ثانیه بستر به تعادل رسیده و پارامتر جدایش که بیانی از میزان جدایش ذرات از هم در بستر می‌باشد، به عدد ۰,۶۳ می‌رسد که نسبت به حالت‌های قبل افزایش قابل توجهی دارد. دلیل این افزایش را در زیاد شدن نسبت اندازه ذرات از هم می‌توان جستجو کرد. در سرعت $u_0 - u_{mf} = 40 \frac{cm}{s}$ ، بعد از گذشت ۳۰ ثانیه بستر به تعادل رسیده و

پارامتر جدایش نیز به عدد $0,06$ می‌رسد. این کاهش شدید نسبت به حالت قبل به دلیل افزایش سرعت ورودی گاز می‌باشد. با افزایش سرعت گاز ورودی بستر به حالت اختلاط کامل نزدیکتر شده است و در سرعت $u_0 - u_{mf} = 60 \frac{cm}{s}$ ، از همان ثانیه‌های اول تعادل در بستر ایجاد شده و همانطور که در نمودار مشخص گردیده است بستر تقریباً به حالت اختلاط کامل می‌باشد. دلیل این امر، افزایش بیشتر سرعت گاز ورودی است. همانطور که ملاحظه گردید به نظر می‌رسد تأثیر سرعت گاز ورودی در مقدار جدایش ذرات بستر بیشتر از تأثیر اندازه ذرات است. همانطور که در شکل (C_3) مشخص است، در سرعت $u_0 - u_{mf} = 20 \frac{cm}{s}$ ، بعد از 30 ثانیه تعادل در بستر ایجاد شده و به طور نسبی $0,51$ از حالت جدایش کامل برای ذرات ایجاد شده است. در سرعت $u_0 - u_{mf} = 40 \frac{cm}{s}$ ، بعد از 20 ثانیه تعادل در بستر ایجاد شده و به طور نسبی $0,3$ از حالت جدایش کامل برای ذرات ایجاد شده است. این کاهش نسبت به حالت قبل به دلیل افزایش سرعت ورودی گاز می‌باشد. اگر این کاهش را با کاهشی که با مورد مشابه ولی نسبت اندازه ذرات $2,5$ مقایسه کنیم متوجه می‌شویم که کاهش عدد جدایش در نسبت اندازه ذرات $3,5$ با افزایش سرعت گاز به مراتب کمتر از حالت مشابه با نسبت اندازه ذرات $2,5$ است. در سرعت $u_0 - u_{mf} = 60 \frac{cm}{s}$ ، بعد از 20 ثانیه عدد جدایش به عدد $0,3$ رسیده است. در اینجا ملاحظه می‌گردد که با افزایش بیشتر سرعت گاز ورودی تغییری در نحوه جدایش ذرات از هم در نسبت اندازه ذرات بالاتر ایجاد نشده است. زمانی که نسبت اندازه ذرات در بستر $1,5$ بود، حالت اختلاط تقریباً کامل در بستر حاکم بوده و افزایش سرعت گاز ورودی تقریباً در اختلاط بی‌اثر بوده و تغییرات قابل توجهی مشاهده نگردید. با افزایش نسبت اندازه ذرات به $2,5$ ، یک افزایش قابل توجهی در میزان جدایش حاصل گردید و عدد جدایش به $0,63$ رسید ولی با افزایش سرعت گاز ورودی به شدت این مقدار افت کرده و حالت اختلاط کامل در بستر ایجاد شده که با افزایش بیشتر سرعت گاز ورودی تغییر قابل توجهی در آن رخ نداد. برای نسبت اندازه ذرات $3,5$ در سرعت گاز ورودی $u_0 - u_{mf} = 20 \frac{cm}{s}$ ، عدد جدایش $0,51$ بدست آمد که نسبت به حالت مشابه با نسبت اندازه ذرات $2,5$ کاهشی در آن ایجاد شده بود ولی با افزایش بیشتر سرعت عدد جدایش به $0,3$ کاهش یافت و در این عدد باقی ماند. می‌توان به این صورت نتیجه‌گیری کرد که نحوه‌ی تغییرات جدایش ذرات در بستر با افزایش نسبت اندازه ذرات در نسبت‌های کم بسیار شدید بوده و سپس شیب تغییرات کاهش یافته و در نسبت‌های بزرگتر حتی منفی نیز می‌شود. همچنین نحوه‌ی تغییرات جدایش ذرات در بستر با افزایش سرعت گاز به صورت کاهشی است که شیب این کاهش در سرعت‌های متوسط گاز ورودی بزرگتر از حالت سرعت‌های گاز ورودی بزرگ و کوچک می‌باشد. نتیجه دیگر این‌که در نسبت اندازه ذرات $3,5$ ، بستر در یک مقدار جدایش مقاومت کرده و افزایش بیشتر سرعت گاز ورودی در این مقدار بی‌اثر است.

۴-۲- مقایسه نتایج شبیه‌سازی با آزمایشات صورت گرفته

در مطالعات آزمایشگاهی که تا کنون انجام گرفته است، نسبت اندازه ذرات ۱،۵ و ۲،۵ در فشار ۱ بار با سرعت $\frac{cm}{s}$ ۱، ۳ و ۱،۳، بررسی شده‌اند و در این بخش به مقایسه بین نتایج دو روش پرداخته، نمودارهایی به‌دست آمده، و نتایج حاصل را تحلیل می‌کنیم. [۳۰ و ۳۶]



شکل ۴: مقایسه تغییرات عدد جدایش در فشار ۱ بار و در نسبت اندازه ذرات (A:۱،۵) و (B:۲،۵) بر حسب

زمان

طبق مشاهدات عینی حاصل از شکل ۴، نتایج حاکی از آن است که با افزایش سرعت در یک نسبت اندازه ثابت میزان جدایش کاهش یافته است و به این نتیجه می‌رسیم که نتایج حاصل از شبیه‌سازی و آزمایشات صورت گرفته با هم مطابقت دارند.

۵- نتیجه‌گیری

بسترهای سیال گاز-جامد به دلیل اهمیت بالایشان در صنعت، مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته‌اند و تلاش‌های بسیاری چه از نظر تجربی و چه از نظر تئوری برای پیش‌بینی رفتار آن‌ها صورت گرفته است. جدایش ذرات به دلیل تفاوت در اندازه‌شان پدیده‌ای متداول در بسترهای سیالی گاز-جامد است. جدایش ذرات بر بازده

انتقال حرارت و انتقال جرم بستر سیالی شده تاثیر می‌گذارد. زمانی که در یک بستر هم ذراتی با اندازه کوچک و هم ذراتی با اندازه بزرگ با چگالی یکسان حضور داشته باشند، ذرات بزرگ‌تر در ته بستر و ذرات کوچک‌تر در بالای بستر جمع می‌شوند. در راکتورهای بستر سیالی که در آن‌ها یک واکنش گرماده رخ می‌دهد، به منظور حذف مناطق گرم^{۱۴} و حذف کاهش کیفیت محصولات، ایجاد اختلاط مناسب در بستر الزامی است. از طرفی دیگر، پدیده جدایش برای فرایندهایی که شامل جداسازی ذرات هستند، الزامی است. به منظور بهبود بازده این فرایندها شناخت مشخصات جدایش و اختلاط در این سیستم‌ها با جزییات بیشتر الزامی به نظر می‌رسد. از طرفی دیگر اکثر بسترهای سیال شده گاز جامد در فشارهای بالا کار می‌کنند لذا ضروری است پدیده اختلاط و جدایش در فشارهای بالا برای این بسترها پیش‌بینی شود. در این پروژه با استفاده از نرم‌افزار MFIX در فشارهای ۱ تا ۶۰ بار بستر سیال شده گاز جامد با ذرات درشت شبیه‌سازی شد. مدل هیدرودینامیکی دو سیال در شبیه‌سازی‌ها به کار گرفته شد. در مجموع در تمامی فشارها و سرعت‌های گاز ورودی، بین نسبت اندازه ذرات ۱٫۵ تا ۳٫۵، مقدار عدد جدایش با افزایش نسبت اندازه ذرات افزایش یافته است ولی رفتارهای متفاوتی بسته به مقدار فشار و سرعت گاز ورودی از خود نشان داد. با افزایش فشار، چگالی گاز افزایش می‌یابد به همین دلیل انتظار می‌رفت که با افزایش فشار بستر همگن‌تر شود ولی این رفتار در بعضی از فشارها نه تنها مشاهده نگردید بلکه رفتاری عکس ثبت گردید. نتایج کلی به‌دست آمده از بررسی‌ها نیز به شرح زیر می‌باشد:

۱. با افزایش سرعت ورودی گاز، بستر به حالت اختلاط کامل نزدیک‌تر می‌شود.
۲. تاثیر سرعت ورودی گاز در مقدار جدایش ذرات بستر بیشتر از تاثیر اندازه ذرات است.
۳. دلیل یکنواختی بستر درحالتی که نسبت اندازه ذرات ۱٫۵ است، به دلیل نزدیک بودن اندازه ذرات به هم است.
۴. میزان جدایش بستر با نسبت اندازه ذره ۱٫۵، وابستگی بسیار کمی به سرعت ورودی گاز دارد.
۵. افزایش جدایش ذرات در بستر با افزایش نسبت اندازه ذرات قابل توجیه است.
۶. با افزایش سرعت ورودی گاز میزان جدایش ذرات در بستر کاهش می‌یابد و اختلاط بیشتر می‌شود.

¹⁴ Hot spots

۷. یکی از دلایلی که در نسبت اندازه ذرات ۳,۵ برای برخی از فشارها، جدایش، در سرعت ورودی گاز بزرگتر

نسبت به سرعت‌های ورودی گاز کوچکتر بیشتر است را می‌توان به نزدیک شدن سرعت ورودی گاز به

مینیمم سرعت سیال شدن نسبت داد.

منابع:

- [1] Gibilaro, L.G., Rowe., P.N., "*A model for a segregating gas fluidized bed*" Chemical Engineering Science, Vol. 29, pp. 1403– 1412, 1974.
- [2] Wu, S.Y., Baeyens, J., "*Segregation by size difference in gas fluidized beds*" Powder Technology, Vol. 98, pp. 139– 150, 1998.
- [3] Naimer, N.S., Chiba, T., Nienow, A.W., "*Parameter estimation for a solids mixing/segregation model for gas fluidized beds*" Chemical Engineering Science. Vol. 37 (7), pp. 1047– 1057, 1982.
- [4] Hoffmann, A.C., Janssen, L.P.B.M. , Prins, J., "*Particle segregation in fluidised binary mixtures*" Chemical Engineering Science, Vol. 48 (9) , pp. 1583– 1592, 1993.
- [5] Basesme, E.A., Levy., E.K., "*Solids exchange between the bubble wake and the emulsion phase in a two-dimensional gas-fluidized bed*", Powder Technology, Vol. 72 , pp. 45–50, 1992.
- [6] Shen, L., Zhang, M., "*Effect of particle size on solids mixing in bubbling fluidized beds*" , Powder Technology , Vol. 97 , pp. 170–177, 1998.
- [7] Abanades, J.C., Kelly, S., Reed.,G.P., "*A mathematical model for segregation of limestone-coal mixtures in slugging fluidised beds*", Chemical Engineering Science., Vol. 49 (23) , pp. 3943–3953, 1994.
- [8] Fernandes, F.A.N., Lona, L.M.F., "*Fluidized-bed reactor modeling for polyethylene production*", Journal of Applied Polymer Science. Vol. 81, pp. 321– 332 , 2001.
- [9] Botterill, J.S.M., Desai, M., "*Fluid Bed Heat Transfer*" Academic Press, London, 1975
- [10] Chen, J.L.-P., Keairns, D.L., "*Particle segregation in a fluidized bed*" Can. J. Chem. Eng., Vol. 53 , pp. 395, 1975.
- [11] Botterill, J.S.M., Desai,M., "*Limited factors in gas-fluidized bed heat transfer*" , Powder Technol., Vol. 6 , pp.231, 1972.

- [12] Chitester, D.C., Kornosky, R.M., Fan, L.-S., Danko, J., "Characteristics of fluidization at high pressure", Chem. Eng. Sci., Vol. 39, pp. 253, 1984.
- [13] Piepers, H.W., Cottaar, E.J.E., Verkooijen, A.H.M., Rietema, K., "Effect of pressure and type of gas on particle-particle interaction and the consequences for gas-solid fluidization behavior", Powder Technol. Vol. 37, pp. 55, 1984.
- [14] Kawabata, J., Yumiyama, M., Tazaki, Y., Honma, S., Chiba, T., Sumiya, T., Ehdo, K., "Characteristics of gas fluidized beds under pressure", J. Chem. Eng. Jpn., Vol. 14, pp. 85, 1981.
- [15] Olowson, P.A., Almstedt, A.E., "Influence of pressure and fluidization velocity on the gas bubble behavior and gas flow distribution in a fluidized bed" Chem. Eng. Sci., Vol. 45, pp. 1733, 1990.
- [16] Hoffman, A.C., Yates, J.G., "Experimental observations of fluidized beds at elevated pressure" Chem. Eng. Commun., Vol. 41, pp. 133, 1986.
- [17] Varadi, T., Grace, J.R., "High pressure fluidization in a two-dimensional bed" in: J.F. Davidson, D.L. Keairns (Eds.), Fluidization, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1978, 55.
- [18] King, D.F., Harrison, D., "The bubble phase in high pressure fluidized beds" in: J.R. Grace, J.M. Matsen (Eds.), Fluidization, Plenum, New York, , pp. 101, 1980.
- [19] Godard, K., Richardson, J.F., "The behavior of bubble-free fluidized beds" Inst. Chem. Eng. Symp. Ser., Vol. 30, pp. 126, 1968.
- [20] Mogan, J.P., Taylor, R.W., Booth, F.L., "The value of the exponent n in Richardson and Zaki equation for fine solids fluidized with gases under pressure" Powder Technol., pp. 286, 1971.
- [21] De Carvalho, J.R.F.G., Harrison, D., "Fluidization under pressure" fluidized combustion Inst. Fuel Symp. Ser., Vol. 1, B1-1, 1975.
- [22] King, D.F., Mitchell, F.R.G., Harrison, D., "The dense phase viscosities of fluidized beds at elevated pressures" Powder Technol., Vol. 18, pp. 55, 1981.
- [23] Knowlton, T.M., "Pressure and temperature effects in fluid-particle systems" in: O.E. Potter, D.J. Nicklin (Eds.), Fluidization, . 7, Engineering Foundation, Broadbeed, Australia, 1992, 27.

- [24] Rowe, P.N., Foscolo, P.U., Hoffman, A.C., Yates, J.G., " *X-ray observation of gas-fluidized beds under pressure*" in: D. Junii, R. Toei (Eds.), *Fluidization*, . 4, Engineering Foundation, Kashikojima, Japan 1984, 53
- [25] Nieuwland, J.J., " *Hydrodynamic modelling of gas-solid two-phase flows*" PhD dissertation, Twente University, Enschede, 1996
- [26] Limtrakul, S., A. Chalermwattanatia et al. " *Discrete particle simulation of solids motion in gas-solid fluidized bed*" *Che.Eng.Sci.* Vol. 58, pp. 915-921, 2003.
- [27] Syamlal, M., " *MFIX Documentation Numerical Technique*" U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy, Federal Energy Technology Center, Morgantown, 1998
- [28] Syamlal, M., Rogers, W. , O'Brien, T.J. " *MFIX Documentation Theory Guide*" U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy ,Morgantown Energy Technology Center, Morgantown, 1993
- [29] Dietiker, J., " *Cartesian Grid User Guide*" September 2009
- [30] Jin Sun, Francine Battaglia. " *Hydrodynamic modeling of particle rotation for segregation in bubbling gas-fluidized beds*", *Chemical Engineering Science Journal*, Vol. 61, pp. 1470-1479, 2006.
- [31] Miller, J.M., H.B. Hamilton, J.D. Sullivan, "Testing of lithium titanate as an alternate blanket material" *Journal of Nuclear Materials*. Vol. 1, pp. 877-880, 1994.
- [32] Wu, S.Y., Baeyen, J. " *Segregation by size difference in gas fluidized beds*", 1998
- [33] Rowe, P.N. , Nienow, A.W. , Agbim, A.J. , *Trans. Inst. Chem. Eng.*, Vol. 50, pp.310 , 1972.
- [34] Chiba, R.F. , Landel, R.F., " *An empirical method of estimating the void fraction mixture of uniform particles of different size*" *Powder Technology.*, Vol. 23, pp. 225-231, 1982.
- [35] GoldschmidtLink, M.J.V., Mellema, J.M., Kuipers, J.A.M., " *Digital image analysis measurements of bed expansion and segregation dynamics in dense gas- fluidized beds*", *Powder Technol*, Vol. 138, pp. 135-159, 2003.
- [36] Dahl, S.R. , Hrenya, C.M., " *Size segregation in gas-solid fluidized beds with continuous size distributions*" *Chemical Engineering Science.*, Vol. 60, pp. 6658-6673, 2005.

علوم شیمی و مهندسی شیمی

3rd National & 1st International Conference in applied research on **Chemistry & Chemical Engineering**