

## بررسی رفتار سیال در یک بستر پرشده ثابت با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی

علیرضا میراولیایی<sup>۱\*</sup>، فرهاد شهرکی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> گروه مهندسی شیمی دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

<sup>۲</sup> گروه مهندسی شیمی دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

دریافت: ۹۳/۵/۶ پذیرش: ۹۳/۱۲/۶

### چکیده

در این تحقیق رفتار سیال در یک بستر پرشده ثابت با نسبت قطر لوله به قطر ذره برابر ۴/۶ با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی بررسی شد. هندسه بستر با استفاده از روش پرکن گسسته مدل شد. شبیه سازی های CFD در گستره عدد رینولدز ۶۱۱/۷۹-۳/۸۵ در رژیم جریان آرام و آشفته انجام شدند. در رژیم جریان آشفته از مدل آشفتگی RNG k-ε استفاده شد. مشاهده شد که جریان سیال در فاصله ۰/۷۵ سانتی متر از ابتدای بستر توسعه یافته می شود. نتایج شبیه سازی های CFD با روابط تجربی موجود در مراجع مقایسه شدند. مقادیر افت فشار پیش بینی شده در رژیم جریان آرام به دلیل اثرات دیوار بیش تر از رابطه Ergun و در رژیم جریان آشفته بدلیل راه گزینی جریان در بستر کم تر از رابطه Ergun تخمین زده شدند. نتایج CFD افت فشار همخوانی خوب با روابط Zhavoronkov و همکارانش و Reichelt نشان دادند.

**کلمات کلیدی:** بستر پرشده ثابت، دینامیک سیالات محاسباتی، رفتار سیال، مدل پرکن گسسته

### مقدمه

جریان سیال از بین ذرات جامد پدیده ای رایج در طبیعت می باشد. سیستم های سیال- جامد، مثل راکتورهای بستر ثابت، راکتورهای بسط یافته و راکتورهای سیاله شده، بطور وسیع در صنایع شیمیایی و بیوشیمیایی استفاده می شوند. پیچیدگی جریان در بسترهای ثابت مانع از درک دقیق ساختار جریان در خلل و فرج بین ذرات شده است.

طراحی موثر و کارآمد تجهیزات فرآیند با در نظر گرفتن توزیع مناسب جریان سیال درون سیستم می تواند انرژی و مواد را بطور مناسب انتقال دهد. توزیع مناسب جریان درون بستر کاتالیستی تابع ظرفیت، جهت جریان و مقاومت اعمال شده توسط صفحات نگه دارنده بستر کاتالیستی می باشد. مقاومت بستر کاتالیستی

\*armiroliaei@uma.ac.ir

را با انتخاب مناسب اندازه ذرات می توان کنترل کرد. حرکت مطلوب سیال با مهار کردن نیروهای فشاری، گرانشی، سطحی یا به کار بردن اجزاء چرخشی - حرکتی به دست می آید. در واقع، هزینه های سرمایه گذاری و شرایط رقابتی باعث شده تا فرآیندهای آتی هزینه کم تر برای ساخت و عملکرد، مصرف کم تر انرژی و مواد خام، کم ترین مقدار ضایعات تولید شده، ایمنی بیش تر و خطر کم تر برای محیط زیست داشته باشند. همچنین تجهیزات موجود برای بهبود عملکردشان نیاز به آنالیز دقیق و طراحی مجدد دارند. برای به دست آوردن این اهداف، دینامیک سیالات محاسباتی<sup>۱</sup> (CFD) یکی از تکنولوژی های توانمند می باشد.

دینامیک سیالات محاسباتی روشی برای حل مدل های ریاضی جریان سیال به کمک کامپیوتر است. CFD قادر به تامین اطلاعات کاملی از فرآیندهای جریان و فرآیندهای انتقال حرارت و انتقال جرم می باشد. CFD به مهندسان فرآیند این امکان را می دهد تا درک و پیش بینی درستی از جریان سیال در تجهیزات فرآیند به دست آورند و طراحی را تغییر دهند. اگر چه CFD به طور کامل نمی تواند جایگزین کارهای آزمایشگاهی و یا روش های متداول استفاده شده در مدل سازی فرآیندهای شیمیایی شود، اما پتانسیل بسیار بالایی برای بهبود مدل سازی های انجام شده دارد. کاربرد CFD منجر به کوتاه تر شدن مسیرهای پیش بینی شده برای تولید محصول، بهینه سازی فرآیندهای موجود برای بهبود راندمان انرژی و طراحی مناسب فرآیندها و محصولات جدید می شود [۱].

اثر هندسه بستر روی مقاومت اصطکاکی تحت شرایط جریان آشفته توسط Tobis [۲]، بررسی شد. بررسی -ها با به طریق آزمایشگاهی و عددی با هوا روی ۶ مدل در آرایش مکعبی انجام شدند. از مدل های آشفتگی  $k-\epsilon$  استاندارد، Spalart and Allmaras، و مدل های تنش رینولدز برای مقایسه پیشگویی های مقاومت اصطکاکی مدل ها استفاده شد. این مقایسه ها همخوانی قابل قبولی را با یکدیگر نشان دادند. همچنین Tobis بیان کرد که روش CFD نسبت به رابطه نیمه تجربی Ergun عمومی تر می باشد. Zeiser و همکارانش [۳]، رفتار جریان را درون هندسه های پیچیده با استفاده از روش شبکه بولتزمن<sup>۲</sup> بررسی کردند. شبیه سازی ها در سه شکل مختلف با ذرات کروی،  $N = 5$ ،  $N = 6$  و  $N = 10$ ، انجام شد. نتایج شبیه سازی آنها اثرات راه گزینی جریان نزدیک دیوار را نشان داد که در آزمایشات مشاهده شدند. Dixon و Nijemeisland [۴]، مدل های موجود برای شبیه سازی راکتورهای گاز- جامد را برای بهبود پروفیل های سرعت و دما درون بستر بر اساس تجزیه و تحلیل میدان های جریان درون آنها توسعه دادند. شبیه سازی های CFD با  $N = 2$  و  $N = 4$  انجام شد. آنها مشاهده کردند که در نزدیک نقاط تماس ذرات با یکدیگر جریان چرخشی ایجاد می شود. Calis و همکارانش [۵]، افت فشار و ضریب درگ را در کانال های مربعی با  $N = 1$  و  $N = 2$  که شامل ۸ و ۴۰ ذره کروی بودند، با استفاده از CFX 5.3 شبیه سازی کردند. مقادیر به دست آمده از شبیه سازی CFD همخوانی خوبی با اندازه گیری های آزمایشگاهی LDA نشان داد. افت فشار ایجاد شده بر اثر جریان سیال توسط Tobis [۶]، به طریق آزمایشگاهی و شبیه سازی CFD بررسی شد. مدل آزمایشگاهی شامل ۸۰۰۰ ذره کروی به قطر ۳۸ میلی متر با آرایش مکعبی بود. اندازه گیر های

<sup>1</sup> Computational Fluid Dynamics

<sup>2</sup> Lattice Boltzmann Method

افت فشار با هوا در رینولدز ۱۲۰۰ انجام شد. آن‌ها نشان دادند، مدل‌های جریان که بر اساس رابطه تجربی به دست آمده‌اند، نمی‌توانند به تنهایی برای طراحی شکل‌های جدید استفاده شوند. اما در صورتی که با کد CFD مناسب ترکیب شوند، قادر به پیشگویی جریان در هندسه‌های پیچیده و بزرگ خواهند بود. Freund و همکارانش [۷]، روش شبکه بولتزمن را برای حل میدان جریان در راکتورهای بستر ثابت با  $N = 4$ ، و  $N = 5$  و  $N = 6.15$  استفاده کردند. گستره عدد رینولدز بررسی شده بین ۰/۱-۱۰۰ بود. آن‌ها برای تأیید رفتار جریان، افت فشار درون بستر را با نتایج و روابط موجود در مراجع مقایسه کردند. نتایج شبیه‌سازی‌هایشان همخوانی خوب با روابط افت فشار و اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی نشان داد. Magnico [۸]، بستر پر شده با  $N = 5.96$  و  $N = 7.8$  را برای بررسی هیدرودینامیک و خواص انتقال شبیه‌سازی کرد. نتایج عددی افت فشار همخوانی خوب با رابطه Ergun در عدد رینولدز بین ۰/۱-۲۰۰ نشان داد.

بعضی از محققان به جای بررسی تمام بستر یا قسمتی از بستر پر شده، فقط یک جفت از ذرات را بررسی کردند، که روش سلول واحد نامیده می‌شود. Gunjal و همکارانش [۹]، آرایش ذرات کروی را با روش سلول واحد بررسی کردند. آن‌ها پیشگویی‌های CFD را با داده‌های آزمایشگاهی موجود در مراجع برای گستره رینولدز بین ۲۰۴/۷۴-۱۲/۱۷ مقایسه کردند. مشاهده کردند که نتایج شبیه‌سازی‌ها همخوانی خوب با داده‌های آزمایشگاهی بجز عدد رینولدز ۱۲/۱۷ نشان می‌دهد که به دلیل مشکلات موجود در ایجاد جریان پایدار در شدت جریان خیلی کم می‌باشد. Reddy و همکارانش [۱۰]، افت فشار و ضریب درگ در بسترهای ثابت و بسط یافته با  $N = 5$  را با استفاده از CFD محاسبه کردند. نتایج CFD را با معادله Ergun در شرایط جریان آرام و آشفته مقایسه کردند. آن‌ها مشاهده کردند که در حالت جریان آرام، افت فشار نسبت به معادله Ergun به دلیل اصطکاک دیوار افزایش می‌یابد و در حالت جریان آشفته، افت فشار نسبت به معادله Ergun به دلیل راه‌گزینی جریان نزدیک دیوار کاهش می‌یابد.

در این تحقیق، رفتار سیال در یک بستر پر شده ثابت به دلیل تأثیر مستقیم جریان سیال روی انتقال حرارت و انتقال جرم و در نتیجه روی راندمان کل مورد بررسی قرار می‌گیرد. شبیه‌سازی‌ها در حالت سه بعدی با استفاده از مدل پرکن گسسته<sup>۱</sup> (DPM) به کمک دینامیک سیالات محاسباتی انجام شدند.

## بسترهای پر شده ثابت<sup>۲</sup>

در فرآیندهای شیمیایی، اغلب بسترهای پر شده ثابت در سیستم‌های کاتالیستی با عنوان راکتورهای بستر ثابت استفاده می‌شوند. این بسترها در ابتدا برای انجام واکنش‌های فاز گاز در ساخت مواد، فرآیندهای احتراق و عملیات تصفیه فاضلاب استفاده شدند. در حال حاضر، اکثر فرآیندهای کاتالیستی صنعتی فاز گاز در این بسترها انجام می‌شوند. تعدادی از فرآیندهای کاتالیستی که در بسترهای ثابت انجام می‌شوند، در جدول ۱ ذکر شده‌اند [۱۱].

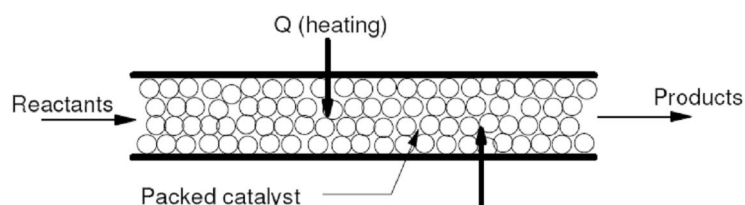
<sup>۱</sup> Discrete Packing Model

<sup>۲</sup> Fixed bed reactors

جدول ۱. برخی فرآیندهای کاتالیستی انجام شده در بستریهای پرشده ثابت [۱۱]

صنایع شیمیایی اصلی	صنایع پتروشیمی	پالایش نفت
ریفرمینگ	اکسید اتیلن	تبدیل کاتالیستی
تبدیل مونواکسید کربن	وینیل استات	ایزومریزاسیون
سنتز آمونیاک	مالیک انیدرید	پلیمریزاسیون
سنتز اسید سولفوریک	فتالیک انیدرید	هیدروکراکینگ
سنتز متانول	استایرن	سولفورزدایی

در بستریهای پرشده ثابت، واکنش های شیمیایی روی سطوح ذرات کاتالیست انجام می شوند. بر اساس طبیعت واکنش ها، عموماً حرارت از طریق دیواره لوله توسط مشعل های بیرونی تامین می شود، یا به وسیله ژاکت های خنک کننده گرفته می شود. طرح کلی یک راکتور بستر ثابت در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. توصیف طرح راکتور بستر ثابت

مشخصات اصلی بستریهای پرشده ثابت شامل نوع پرکن، نسبت ارتفاع به قطر (L/D) و نسبت قطر لوله به قطر ذره (N = D/d<sub>p</sub>) می باشند. برای کاهش افت فشار در شدت جریان های بالا، قطر ذرات بزرگ انتخاب می شود، درحالی که قطر لوله به دلیل افزایش انتقال حرارت شعاعی نسبتاً کوچک در نظر گرفته می شود.

### رژیم های جریان در بستریهای پرشده ثابت

پدیده های فیزیکی و شیمیایی بر اثر جریان سیال در بستریهای پرشده ثابت توسط متغیرهایی از قبیل مشخصات فیزیکی سیال (دانسیته، ویسکوزیته، تراکم پذیری و تراکم ناپذیری)، اندازه، شکل و زبری ذرات تشکیل دهنده بستر، نکه دارنده بستر، نسبت قطر لوله به قطر ذرات کاتالیست و همچنین متغیرهای سینماتیکی از قبیل شدت جریان، فشار و دما و مشخصات مکانیکی از قبیل طراحی توزیع کننده ها تحت تاثیر قرار می گیرند. بستگی به شدت جریان و طبیعت محیط متخلخل، الگوهای متفاوت جریان با سیالات نیوتنی در بستریهای پر شده ثابت مشاهده شده است. Dixon و همکارانش [۱۴] چهار رژیم جریان ارائه شده توسط Dybbs و Edwards، را در بستریهای ثابت به طریق آزمایشگاهی بررسی کردند. آن ها چهار رژیم جریان را در گستره وسیعی از عدد رینولدز به شرح زیر بیان کردند:

- رژیم جریان دارسی یا خزشی (رژیم ویسکوز) که در عدد رینولدز کمتر از یک ( $Re < 1$ ) اتفاق می‌افتد. در این رژیم اثر نیروهای ویسکوز بیشتر از سایر نیروها است و افت فشار به‌طور خطی متناسب با سرعت درون شبکه می‌باشد.
- رژیم جریان آرام یکنواخت که در عدد رینولدز بین ۱ تا ۱۵۰ ( $1 < Re < 150$ ) اتفاق می‌افتد. در این حالت افت فشار به‌طور غیر خطی وابسته به سرعت درون شبکه می‌باشد.
- رژیم جریان آرام غیر یکنواخت که در عدد رینولدز بین ۱۵۰ تا ۳۰۰ ( $150 < Re < 300$ ) اتفاق می‌افتد. در این رژیم جریان، حالت‌های نوسانی در خلل و فرج بین ذرات آشکار می‌شوند و جریان‌های گردابی حدوداً در رینولدز ۲۵۰ تشکیل می‌شوند.
- رژیم جریان کاملاً آشفته و غیر یکنواخت که در عدد رینولدز بیش‌تر از ۳۰۰ ( $Re > 300$ ) اتفاق می‌افتد. این حالت از لحاظ کیفی مانند جریان آشفته درون لوله‌ها در حالت جریان متلاطم می‌باشد.

#### افت فشار در بسترهای پرشده ثابت

هنگامی که سیال از درون بستر کاتالیستی عبور می‌کند، با ذرات درون بستر برهم کنش نشان می‌دهد که سبب افت فشار آن می‌شود. افت فشار یکی از پارامترهای مهم برای طراحی و بررسی عملکرد بسترهای پرشده می‌باشد. از این پارامتر برای تأیید شبیه‌سازی میدان جریان درون بستر استفاده می‌شود. افت فشار در بسترهای پر شده بستگی به فضای خالی درون بستر، اندازه و شکل ذرات دارد. بررسی‌های آزمایشگاهی بسیار زیادی در زمینه افت فشار درون بسترهای ثابت انجام شده است. از نخستین بررسی‌ها انجام شده در زمینه افت فشار درون بسترهای ثابت می‌توان به کارهای انجام شده توسط Carman [۱۵]، Zhavoronkov و همکارانش [۱۶]، Ergun [۱۷]، Reichelt [۱۸]، اشاره کرد. روابط تجربی به‌دست آمده توسط این محققان، افت فشار بر واحد طول بستر را بر حسب تابعی از سرعت، مشخصات هندسه بستر و خواص فیزیکی سیال بیان می‌کند.

Zhavoronkov و همکارانش [۱۶]، با انجام آزمایشات، رابطه درجه دوم زیر را برای گستره وسیعی از اعداد رینولدز بیان کردند:

$$\frac{\Delta P}{L} = A \frac{\mu u}{d_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + B \frac{\rho u^2}{d_p} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \quad (1)$$

در بسترهای ثابت با  $N < 10$ ، فضای خالی نزدیک دیوار و اصطکاک دیوار، اثر قابل ملاحظه‌ای روی افت فشار کل بستر دارند. Zhavoronkov و همکارانش، این اثرات را در روابط زیر در نظر گرفتند:

$$A = 163.35 A_w^2 \quad (1-1)$$

$$B = 1.2 B_w \quad (1-2)$$

$$A_w = B_w = 1 + \frac{1}{2 \left( \frac{D}{d_p} \right) (1-\varepsilon)} \quad (1-3)$$



Ergun [۱۷]، رابطه نیمه تجربی، برای جریان کاملاً توسعه یافته در بستریهای ثابت، با ترکیب معادلات Kozeny و Carman، در رژیم جریان خزشی و معادله Burke و Plummer، در رژیم جریان آشفتنه، به شکل زیر پیشنهاد کرد:

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{\mu u}{d_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + 1.75 \frac{\rho u^2}{d_p} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \quad (۲)$$

رابطه فوق، جریان آرام یا آشفتنه، برای حالتی است که  $N > 10$  باشد. در این حالت تقریباً شرایط یکنواختی از نظر فضای خالی در تمام بستر وجود دارد. Reichelt [۱۸]، با در نظر گرفتن اثرات دیوار معادله Ergun را به شکل زیر تصحیح کرد:

$$\frac{\Delta P}{L} = K_1 A_w^2 \frac{\mu u}{d_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + \frac{A_w}{B_w} \frac{\rho u^2}{d_p} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \quad (۳)$$

در رابطه فوق:

$$A_w = 1 + \frac{2}{3 \left( \frac{D}{d_p} \right) (1-\varepsilon)} \quad (۳-۱)$$

$$B_w = \left[ k_1 \left( \frac{d_p}{D} \right)^2 + k_2 \right]^2 \quad (۳-۲)$$

مقادیر  $K_1$ ،  $k_1$  و  $k_2$  در روابط فوق برای ذرات کروی درون بستر به ترتیب برابر ۱۵۴، ۱/۱۵ و ۰/۸۷ می باشند.

Joshi و Pandit [۱۹]، ضریب درگ را در بستریهای ثابت به شکل زیر تعریف کردند:

$$C_d = \frac{F_D / A_p}{(1/2) \rho u^2} \quad (۴)$$

که:

$$F_D = \frac{\Delta P}{L} \frac{V_p}{(1-\varepsilon)} \quad (۵)$$

ضریب درگ از ترکیب معادلات فوق و با فرض کروی بودن ذرات به شکل زیر بیان می شود:

$$C_d = \frac{(\Delta P / L) (d_p / 6)}{(1/2) \rho u^2 (1-\varepsilon)} \quad (۶)$$

در روابط فوق،  $F_D$  نیروی درگ روی یک ذره،  $A_p$  سطح ذره و  $V_p$  حجم ذره می باشند.

## مدل سازی CFD بسترهای پر شده ثابت

### معادلات انتقال ممنتوم<sup>۱</sup>

معادله بقای جرم<sup>۲</sup> (معادله پیوستگی) به شکل زیر تعریف می شود:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (7)$$

معادله بقای ممنتوم<sup>۳</sup> در جهت  $i$  با رابطه زیر بیان می شود:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial(-\rho \overline{u'_i u'_j})}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (8)$$

در این موازنه  $P$  فشار استاتیکی،  $\mu$  ویسکوزیته مولکولی سیال و  $\rho g_i$  نیروی گرانش می باشند.

در معادله فوق، تنش های رینولدز،  $(-\rho \overline{u'_i u'_j})$ ، با فرضیه Boussinesq مدل می شوند:

$$(-\rho \overline{u'_i u'_j}) = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \rho k + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (9)$$

که ویسکوزیته آشفته،  $\mu_t$ ، بر حسب انرژی جنبشی آشفته،  $k$ ، و شدت پراکندگی آن،  $\varepsilon$ ، تعریف می شود [۱۴].

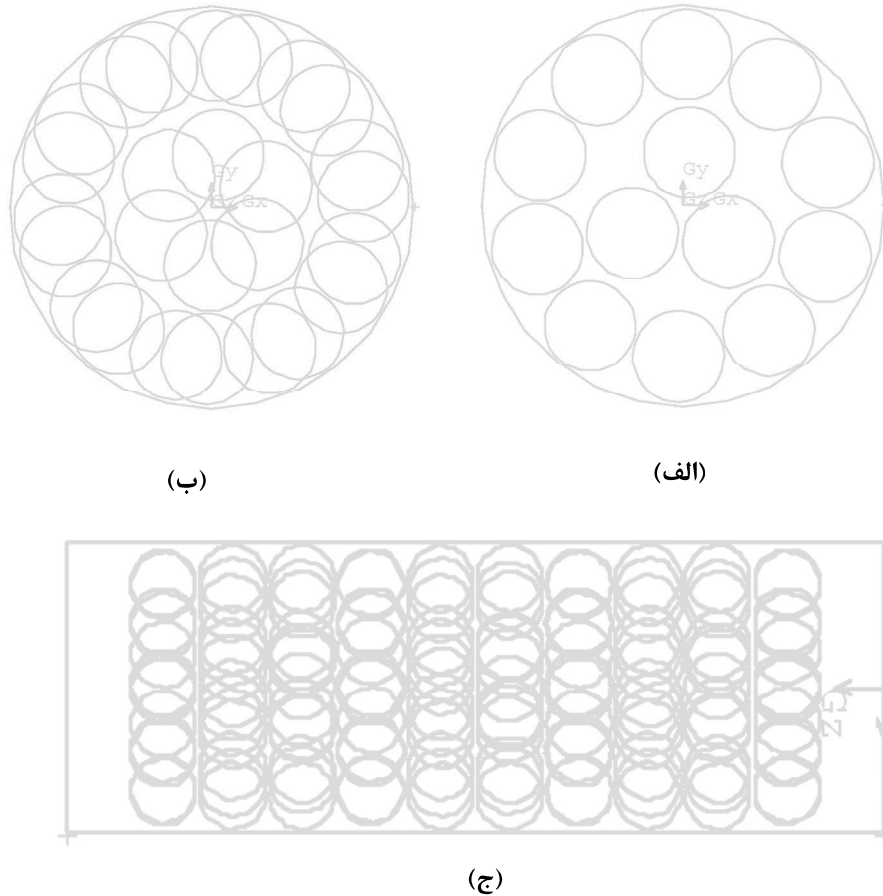
### هندسه محاسباتی و تولید شبکه

هندسه سه بعدی شامل ۱۳۰ ذره کروی به قطر ۰/۵ سانتیمتر در ۱۰ لایه بر اساس مدل پرکن گسسته (DPM) با نسبت قطر لوله به قطر ذره برابر ۴/۶ ( $N = 4.6$ ) در شبیه سازی های CFD مورد بررسی قرار گرفت. ارتفاع بستر ثابت برابر ۵/۲۷ سانتی متر و فاصله ذرات از ابتدا و انتهای بستر برابر ۰/۷۵ سانتی متر در نظر گرفته شد. برای این که نتایج شبیه سازی ها به واقعیت نزدیک شوند، لایه های ذرات به فاصله ۰/۰۳ سانتی متری از یکدیگر درون بستر قرار گرفتند. شکل ۲ (الف) و (ب) آرایش دو بعدی ذرات درون بستر را در یک لایه و دو لایه نشان می دهد. برای این که جریان درون بستر حالت پلاگ داشته باشد و همچنین برای این که سیال به طور مستقیم از فضای بین ذرات خارج نشود، هر لایه نسبت به لایه زیری اش به اندازه ۶۰ درجه در خلاف جهت عقربه های ساعت حول محور بستر چرخیده شد. چیدمان تمام ذرات درون بستر در شکل ۲ (ج) نشان داده شده است.

<sup>1</sup> Momentum transport equations

<sup>2</sup> Continuity equation

<sup>3</sup> Momentum conservation equation



شکل ۲. نمایش مدل هندسه بستر ثابت: (الف) آرایش ذرات در یک لایه، (ب) آرایش ذرات در دو لایه، (ج) آرایش ذرات در طول بستر

از مش نامنظم تتراهیدرال، به دلیل پیچیدگی هندسه که ناشی از تعداد زیاد ذرات درون بستر می باشد، برای شبکه بندی هندسه استفاده شد [۱۴].

### مشخصات سیال و شرایط مرزی

هوا به عنوان سیال در شبیه سازی های جریان سیال درون بستر ثابت انتخاب شد. ارتباط فشار- سرعت با استفاده از الگوریتم SIMPLE<sup>۱</sup> انجام شد. برای به دست آوردن دقت بیش تر نتایج از طرح آپ ویند مرتبه دو<sup>۲</sup> برای گسسته سازی جملات جابه جایی در معادلات ممنوم و آشفتگی استفاده شد. شرایط مرزی استفاده شده در حالت جریان پایا به شرح زیر می باشند:

- سرعت ثابت در ورودی بستر

<sup>۱</sup> Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations

<sup>۲</sup> Second-order upwind scheme



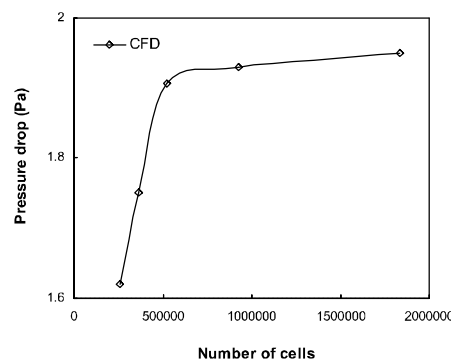
- فشار ثابت در خروجی بستر
- شرط عدم لغزش سرعت در سطح دیوار و ذرات

### نتایج و بحث

نتایج شبیه سازی‌های CFD با روابط تجربی در گستره وسیعی از عدد رینولدز،  $611/79-3/85$ ، جریان آرام و آشفته، در این قسمت مقایسه می‌شوند. از مدل آشفتگی  $k-\varepsilon$  RNG در رژیم جریان آشفته استفاده شد. استفاده از این مدل به دلیل داشتن جمله اضافی  $R$  در معادله  $\varepsilon$ ، سبب می‌شود تا مشخصات جریان از قبیل خمیدگی خطوط جریان، جریان‌های گردابی و چرخشی در هندسه‌های بسیار پیچیده مثل بسترهای پر شده ثابت بهتر مدل شوند. برای درک بهتر جریان سیال تمام شبیه سازی‌ها در حالت سه بعدی انجام شدند.

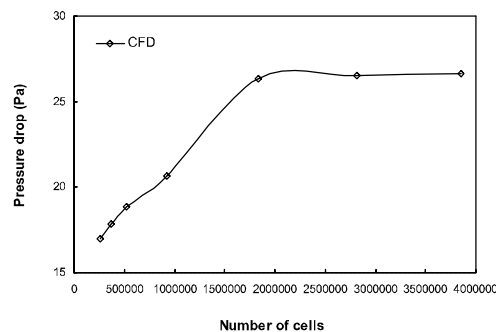
### حساسیت به اندازه شبکه

برای داشتن حل مناسب، باید حساسیت نتایج شبیه سازی به اندازه گره‌ها کنترل شود. برای همگرایی شبکه لازم است بعد از یک اندازه معین از گره‌ها، نتایج عددی با کاهش بیش‌تر اندازه شبکه تغییر چندانی نداشته باشند. این موضوع را برای دو رژیم جریان آرام و آشفته مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای بررسی حساسیت نتایج به اندازه شبکه در رژیم جریان آرام، اندازه‌های شبکه برابر  $0/06$ ،  $0/05$ ،  $0/04$ ،  $0/07$  و  $0/08$  در نظر گرفته شدند. همچنین فرض شد که سرعت سیال در ورودی برابر  $0/1461$  متر بر ثانیه باشد که معادل عدد رینولدز  $41/514$  می‌باشد. نتایج حاصل از شبیه سازی‌ها با اندازه‌های مختلف شبکه در شکل ۳ نشان داده شده‌اند. به‌طوریکه در شکل مشاهده می‌شود با انتخاب اندازه شبکه بزرگ، تعداد سلول‌های شبکه کاهش می‌یابد که سبب می‌شود افت فشار به‌دست آمده نسبت به مقدار واقعی کم‌تر تخمین زده شود. اما با افزایش تعداد سلول‌های شبکه نتایج به مقدار واقعی نزدیک‌تر می‌شوند. همان‌طوری که در شکل مشاهده می‌شود، با افزایش تعداد سلول‌های شبکه به تعدادی بیش‌تر از  $524151$  تغییر قابل ملاحظه‌ای در مقدار افت فشار حاصل نمی‌شود.



شکل ۳. افت فشار درون بستر ثابت بر حسب تعداد سلول‌های شبکه در رژیم جریان آرام

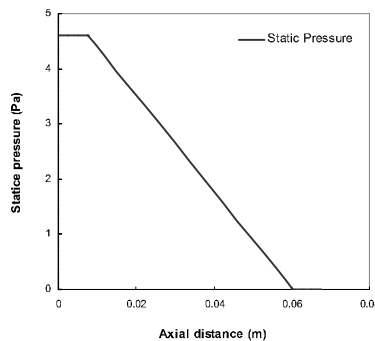
برای بررسی عدم وابستگی نتایج به اندازه شبکه در رژیم جریان آشفته، شبکه با اندازه های  $0.03$ ،  $0.02$ ،  $0.04$ ،  $0.05$ ،  $0.06$ ،  $0.07$  و  $0.08$  انتخاب شدند. هندسه مورد نظر برای مدل آشفته RNG k- $\epsilon$  با هر یک از این اندازه های شبکه مورد بررسی قرار گرفت. برای انتخاب مش بهینه، مجدداً افت فشار درون بستر به عنوان پارامتر مورد بررسی در نظر گرفته شد. همچنین فرض شد که سرعت سیال در ورودی برابر  $0.8764$  متر بر ثانیه باشد که معادل عدد رینولدز  $260/0.381$  می باشد. با توجه به شکل ۴ مشاهده می شود که در اندازه شبکه کمتر از  $0.04$  تغییر محسوسی در نتایج افت فشار شبیه سازی شده حاصل نمی شود. به عبارت دیگر با ریزتر کردن اندازه سلول های شبکه به مقداری کمتر از  $0.04$  تغییر قابل ملاحظه ای در نتایج افت فشار حاصل نمی شود.



شکل ۴. افت فشار درون بستر ثابت برحسب تعداد سلول های شبکه در رژیم جریان آشفته

#### بررسی اثرات سیال در ابتدا و انتهای بستر

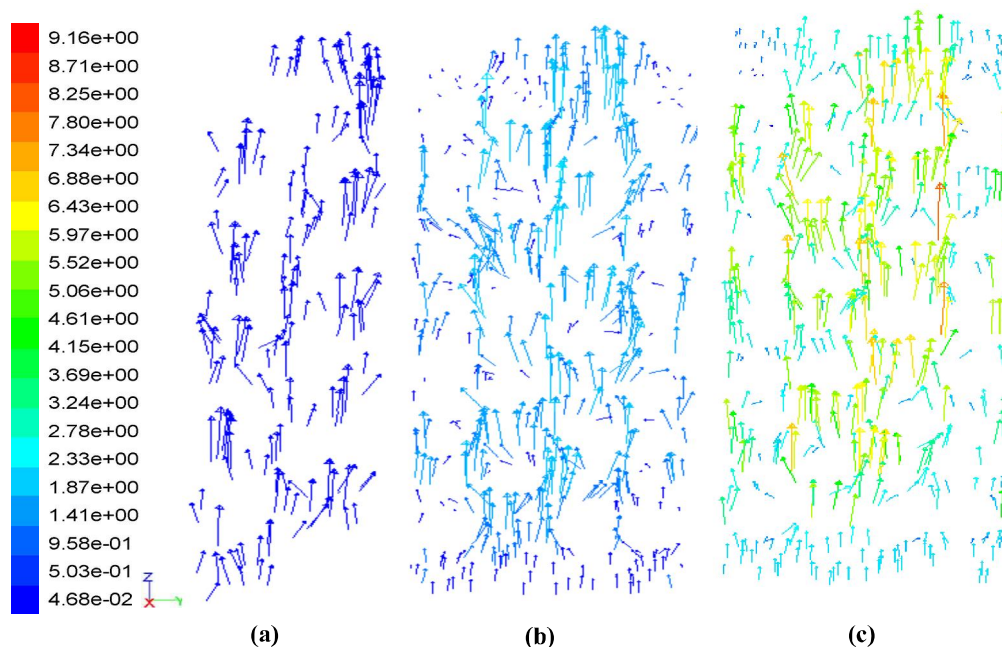
برای ایجاد حالت توسعه یافتگی جریان در ابتدای بستر و یا حذف گرادیان های سرعت در ورودی که سبب ناپایداری حل می شوند، فاصله ذرات درون بستر از ابتدا و انتهای آن  $0.25$ ،  $0.5$ ،  $0.75$ ،  $1$ ،  $1.5$  و  $3$  سانتی متر در نظر گرفته شد. شبیه سازی ها برای هر کدام از این فاصله ها با مش بهینه انجام شدند. مشاهده شد که حالت توسعه یافتگی جریان در فاصله  $0.75$  سانتی متری از ابتدای بستر به دست می آید. چنین حالتی برای فاصله ذرات از ابتدای بستر که کمتر از  $0.75$  سانتی متر باشد، در شبیه سازی ها مشاهده نشد. پروفیل فشار استاتیکی در طول بستر برای عدد رینولدز  $84/438$  در شکل ۵ نشان داده شده است. با توجه به شکل مشاهده می شود که فشار در ابتدا و انتهای بستر ثابت است یعنی اثرات ابتدایی و انتهایی درون بستر وجود ندارد.



شکل ۵. پروفیل فشار استاتیکی در طول بستر در  $Re = 84.438$

### پروفیل بردارهای سرعت درون بستر ثابت

برای بررسی توزیع سیال درون بستر پر شده، بردارهای سرعت در یک صفحه دو بعدی برای سه عدد رینولدز ۳/۸۵، ۱۲۷/۸۴ و ۶۱۱/۷۹ در شکل ۶ نشان داده می شوند. فضاهای باز در شکل سطوح ذرات می باشند که جریان سیال درون آنها وجود ندارد. بردارهای سرعت بر اساس بزرگی شان به صورت رنگی نشان داده شده اند و طول بردار با اندازه بردار سرعت متناسب است. همچنین جهت بردارهای سرعت جهت جریان سیال درون بستر را نشان می دهد. به دلیل این که شبکه در نزدیک ذرات ریز می باشد، بردارهای بیش تری در این نقاط مشاهده می شوند. همان طوری که در شکل مشاهده می شود، سیال اطراف ذرات جریان می یابد و در شکاف بین ذرات شتاب می گیرد. مشاهده می شود که در رینولدز ۳/۸۵ بین ذرات گرداب تشکیل نمی شود، در حالی که در رینولدز ۱۲۷/۸۴ بین ذرات گرداب شروع به تشکیل شدن می کند. گرداب تشکیل شده در خروجی بستر سبب می شود جریان از بالای ذرات به سمت پایین حرکت کند که سبب جریان محوری به سمت پایین می شود. همچنین راه گزینی جریان در قسمت هایی از بستر که فضای خالی آن زیاد است، اتفاق می افتد. در شکل ۶(a)، سرعت های محلی درون بستر تقریباً با سرعت ظاهری برابر می باشند، اما سرعت های محلی درون بستر در شکل های ۶(b) و ۶(c) تقریباً ۱۰ و ۳ برابر سرعت ظاهری می باشند. به طوری که در شکل مشاهده می شود، نزدیک دیوار و در نقاط تماس، جریان سیال از نقاط دیگر درون بستر کمتر است. به دلیل سطوح محدود کننده جریان، راه گزینی جریان درون بستر مشاهده می شود که این پدیده با افزایش شدت جریان سیال افزایش می یابد. همچنین بر اثر برخورد سیال با ذرات درون بستر، جریان شعاعی از مرکز به سمت دیوار و نقاط ساکن در بعضی قسمت های بستر در شبیه سازی ها مشاهده شد.

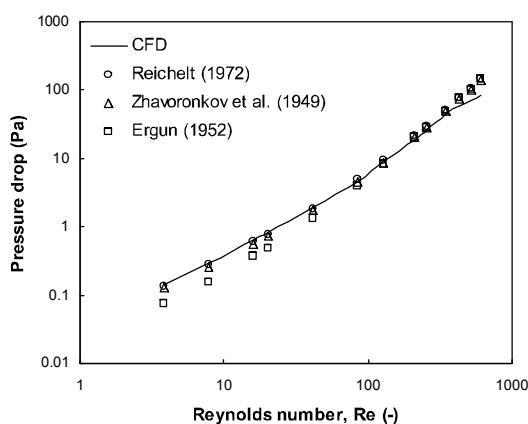


شکل ۶. پروفیل بردارهای سرعت درون بستر: (a)  $Re = 3.85$ , (b)  $Re = 127.84$ , (c)  $Re = 611.79$

## افت فشار درون بستر ثابت

اختلاف فشار بین پایین و بالای بستر، افت فشار درون بستر را نشان می دهد. افت فشار در بسترهای ثابت شامل اثرات اصطکاکی (جمله ویسکوز) و اینرسی (جمله جنبشی) می باشد، که به صورت خطی و غیر خطی (درجه دوم) به سرعت سیال وابسته است. در بسترهای پر شده ثابت با  $N < 10$ ، اصطکاک دیوار اثر قابل ملاحظه ای روی افت فشار کل بستر دارد [۱۰].

نتایج افت فشار حاصل از شبیه سازی CFD با روابط تجربی ارائه شده توسط Zhavoronkov و همکارانش [۱۶]، Ergun [۱۷] و Reichelt [۱۸]، در رژیم جریان آرام و آشفته برحسب عدد رینولدز در شکل ۷ مقایسه می شوند. با توجه به شکل مشاهده می شود که نتایج به دست آمده از شبیه سازی های CFD با داده های آزمایشگاهی همخوانی بسیار خوبی دارند. در  $Re < 150$  به دلیل اصطکاک دیوار یا اثرات نیروهای ویسکوز در دیوار (زیاد بودن ضخامت لایه مرزی)، مقادیر افت فشار شبیه سازی شده نسبت به معادله Ergun بیش تر و در  $Re > 150$  به دلیل راه گزینی جریان در بستر مقادیر افت فشار شبیه سازی شده کم تر از مقادیر رابطه Ergun می باشند؛ زیرا در جریان آشفته اثر اصطکاک دیوار به لایه مرزی کوچک محدود می شود، در واقع در این حالت ضخامت لایه مرزی کم است. بنابراین در جریان آشفته اثر اصطکاک دیوار نسبت به اثر تخلخل درون بستر ناچیز می باشد و اثر راه گزینی جریان از اهمیت بیش تری برخوردار است. همچنین با توجه به شکل مشاهده می شود که دقت رابطه Ergun نسبت به دو رابطه دیگر کم تر است؛ زیرا ثوابت رابطه Ergun برای تمام بسترهای پر شده با نسبت قطر لوله به قطر ذره مختلف (N) ثابت می باشند، اما ثوابت در روابط Zhavoronkov و همکارانش و Reichelt تابعی از نسبت قطر لوله به قطر ذره می باشند که با تغییر این نسبت ثوابت این روابط تغییر می کنند.

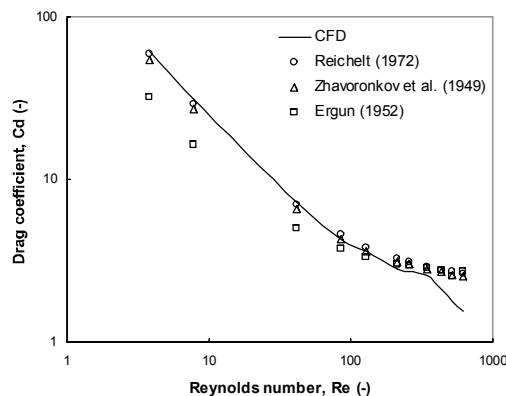


شکل ۷. افت فشار در طول بستر بر حسب عدد رینولدز

## ضریب درگ درون بستر ثابت

ضریب درگ شامل نیروهای درگ هیدرودینامیک روی ذرات و دیوار بستر می باشد. مقادیر ضریب درگ حاصل از شبیه سازی ها با ضریب درگ به دست آمده از معادلات Zhavoronkov و همکارانش، Ergun و

Reichelt، در شکل ۸ مقایسه می شوند. همان طوری که مشاهده می شود، ضریب درگ حاصل از شبیه سازی ها در رینولدزهای پایین نسبت به ضریب درگ محاسبه شده بر اساس روابط تجربی بیش تر است؛ زیرا ضخامت لایه مرزی در این حالت زیاد است و اثرات اصطکاک دیوار روی جریان نزدیک دیوار افزایش می یابد و افت فشار کل بستر را تحت تاثیر قرار می دهد. در رینولدزهای بالا ضریب درگ به علت کانالیزه شدن جریان، کاهش مقاومت در برابر جریان سیال، که سبب کاهش افت فشار می شود، نسبت به روابط تجربی کم تر است. به عبارت دیگر در رینولدزهای بالا که جریان آشفته است، اثر راه گزینی جریان بیش تر از اثر اصطکاک دیوار می باشد که سبب کاهش مقادیر ضریب درگ شبیه سازی شده در جریان آشفته نسبت به روابط تجربی می شود.



شکل ۸. ضریب درگ بر حسب عدد رینولدز

### نتیجه گیری

در این تحقیق، یک مدل سه بعدی دینامیک سیالات محاسباتی برای بررسی جریان سیال درون بسترهای ثابت ارائه شد. هندسه بستر ثابت با استفاده از روش پرکن گسسته مدل شد. به دلیل این که در این مدل ذرات به طور مجزا درون بستر قرار داده می شوند، اثرات برهم کنش بین ذرات و سیال بهتر مدل شدند. اثرات سیال در ورودی بستر با تغییر طول ابتدایی و انتهایی بستر مورد بررسی قرار گرفتند. مشخص شد که با انتخاب طول ابتدایی و انتهایی بستر برابر ۰/۷۵ سانتی متر حالت توسعه یافتگی در جریان ورودی به بستر به وجود آمد.

از روابط تجربی موجود در مراجع، روابط Zhavoronkov و همکارانش [۱۶]، Ergun [۱۷] و Reichelt [۱۸]، برای تأیید نتایج شبیه سازی ها درون بستر ثابت در رژیم جریان آرام و آشفته استفاده شد. با توجه به نتایج به دست آمده مشخص شد که در رژیم جریان آرام دلیل اثر اصطکاک دیوار و زیاد بودن ضخامت لایه مرزی نتایج شبیه سازی های CFD نسبت به معادله Ergun بیش تر تخمین زده شدند. در حالی که در رژیم جریان آشفته به دلیل راه گزینی جریان و کم بودن ضخامت لایه مرزی این مقادیر کم تر از رابطه Ergun



تخمین زده شدند. همچنین مشاهده شد که دقت رابطه Ergun نسبت به دو رابطه دیگر کم تر می باشد؛ زیرا ثوابت رابطه Ergun برای تمام بسترهای پر شده با نسبت قطر لوله به قطر ذره مختلف (N) ثابت می باشند، اما ثوابت در روابط Zhavoronkov و همکارانش و Reichelt تابعی از نسبت قطر لوله به قطر ذره می باشند که با تغییر این نسبت ثوابت این روابط تغییر می کنند.

مقادیر ضریب درگ حاصل از شبیه سازی ها با ضریب درگ به دست آمده از معادلات Zhavoronkov و همکارانش، Ergun و Reichelt، مقایسه شدند. مشاهده شد که ضریب درگ حاصل از شبیه سازی ها در رینولدزهای پایین نسبت به ضریب درگ محاسبه شده بر اساس روابط تجربی بیش تر می باشد؛ زیرا ضخامت لایه مرزی در این حالت زیاد است که سبب افزایش اثرات اصطکاک دیوار روی جریان نزدیک دیوار می شود. در رینولدزهای بالا ضریب درگ به علت کانالیزه شدن جریان نسبت به روابط تجربی کم تر تخمین زده شد؛ زیرا در رینولدزهای بالا اثر راه گزینی جریان بیش تر از اثر اصطکاک دیوار می باشد که سبب کاهش مقادیر ضریب درگ شبیه سازی شده نسبت به روابط تجربی در جریان آشفته می شود.

#### علائم و نشانه ها

ضرایب در معادلات افت فشار	A, B, A <sub>w</sub> , B <sub>w</sub>
سطح ذره، m <sup>2</sup>	A <sub>p</sub>
ضریب درگ	C <sub>d</sub>
قطر ذره، m	d <sub>p</sub>
قطر لوله، m	D
نیروی درگ روی یک ذره، kg.m/s <sup>2</sup>	F <sub>D</sub>
شتاب گرانش در جهت i، m/s <sup>2</sup>	g <sub>i</sub>
انرژی جنبشی آشفته، J/kg	k
ثوابت معادله Reichelt	K <sub>1</sub> , k <sub>2</sub> , k <sub>1</sub>
ارتفاع بستر یا طول لوله، m	L
فشار استاتیک، Pa	P
زمان، s	t
سرعت ظاهری سیال، m/s	u
مولفه سرعت نوسانی، m/s	u <sub>i</sub>
مولفه سرعت متوسط، m/s	ū <sub>i</sub>
حجم ذره، m <sup>3</sup>	V <sub>p</sub>
مختصه، m	x

## حروف یونانی

افت فشار، Pa	$\Delta P$
شدت پراکندگی آشفته، J/kg.s	$\varepsilon$
ضریب تخلخل بستر	$\varepsilon$
ویسکوزیته مولکولی، Pa.s	$\mu$
ویسکوزیته آشفته، Pa.s	$\mu_t$
دانسیته، kg/m <sup>3</sup>	$\rho$

## منابع

1. Joshi J. and Ranade V., Computational fluid dynamics for designing process equipment: Expectations, current status, and path forward, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 42, 2003, pp 1115-1128.
2. Tobis J., Influence of bed geometry on its frictional resistance under turbulent flow conditions, *Chemical Engineering Science*, Vol. 55, 2000, pp 5359-5366.
3. Zeiser T., Lammers P., Klemm E., Li Y.W., Bernsdorf J. and Brenner G., CFD calculation of flow, dispersion and reaction in a catalyst filled tube by the Lattice Boltzmann method, *Chemical Engineering Science*, Vol. 56, 2001, pp 1697-1704.
4. Dixon A.G. and Nijemeisland M., CFD as a design tool for fixed-bed reactors, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 40, 2001, pp 5246-5254.
5. Calis H.P.A., Nijenhuis J., Paikert B.C., Dautzenberg F.M. and van den Bleek, C.M., CFD modeling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing, *Chemical Engineering Science*, Vol. 56, 2001, pp 1713-1720.
6. Tobis J., Modeling of the pressure drop in the packing of complex geometry, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 41, 2002, pp 2552-2559.
7. Freund H., Zeiser T., Huber F., Klemm E., Brenner G., Durst F. and Emig G., Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation, *Chemical Engineering Science*, Vol. 58, 2003, pp 903-910.
8. Magnico P., Hydrodynamic and transport properties of packed beds in small tube to sphere diameter ratio: Pore scale simulation using an Eulerian and a Lagrangian approach, *Chemical Engineering Science*, Vol. 58, 2003, pp 5005-5024.
9. Gunjal P.R., Ranade V.V. and Chaudhari R.V., Computational study of a single phase flow in packed beds of spheres, *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Vol. 51, 2005, pp 365-378.
10. Reddy R.K. and Joshi J.B., CFD modeling of pressure drop and drag coefficient in fixed and expanded beds, *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 86, 2008, pp 444-453.
11. Froment G.F. and Bischoff K.B., Chemical reactor analysis and design, 2<sup>nd</sup> Edition, *Wiley, New York*, 1990.
12. Jakobsen H.A., Chemical reactor modeling multiphase reactive flows, *Springer-Verlag, Berlin Heidelberg*, 2008.
13. Afandizadeh S.a., Design of packed bed reactors: Guides to catalyst shape, size, and loading selection, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 21, 2001, pp 669-682.



14. Dixon A.G., Nijemeisland M. and Stitt E.H., Packed tubular reactor modeling and catalyst design using computational fluid dynamics, *Advances in Chemical Engineering*, Vol. 31, 2006, pp 307-389.
15. Carman P.C., Fluid flow through granular beds, *Transaction of the Institution of Chemical Engineering*, Vol. 15, 1937, pp 150–166.
16. Zhavoronkov N.M., Aerov M.E. and Umnik N.N., Hydraulic resistance and density of packing of a granular bed, *The Journal of Physical Chemistry*, Vol. 23, 1949, pp 342-361.
17. Ergun S., Fluid flow through packed columns, *Chemical Engineering Progress*, Vol. 48, 1952, pp 89–94.
18. Reichelt W., Zur Berechnung des Druckverlustes einphasig durchstroK mter Kugel und ZylinderschuK ttungen. *Chemie-Ingenieur-Technik*, Vol. 44, 1972, pp 1068-1071.
19. Pandit A.B., and Joshi J.B., Pressure drop in fixed, expanded and fluidized beds, packed columns and static mixers a unified approach, *Reviews in Chemical Engineering*, Vol. 14, 1998, pp 321–371.