

شبیه سازی دو فازی رآکتور های بستر سیال شده گاز-جامد با مدل تانک های سری

روزبه جعفری، رحمت ستوده قره باغ و نوید مستوفی*⁺

تهران، دانشگاه تهران، دانشکده فنی، گروه مهندسی شیمی، مرکز تحقیقاتی طراحی و شبیه سازی فرایندها، صندوق پستی ۱۱۳۶۵-۴۵۶۳

چکیده: در این مقاله مدل جدیدی برای شبیه سازی رآکتورهای بسترسیال شده بر مبنای روش تانک های سری ارائه شده است که قابل استفاده در نرم افزارهای شبیه ساز فرایند است. در این مدل بسترسیال شده به تعدادی بخش برابر تقسیم می شود و هر بخش شامل فاز حباب و فاز امولسیون است. در هر بخش دو پدیده واکنش شیمیایی و انتقال جرم به صورت هم زمان رخ می دهد. فاز حباب با استفاده از رآکتور جریان قالبی و فاز امولسیون با استفاده از رآکتور به طور کامل آمیخته مدل شده اند. ویژگی های هیدرودینامیکی فازها با استفاده از مدل دینامیک دوفازی محاسبه می شود. اعتبار مدل ارائه شده به کمک داده های تجربی به دست آمده از مقاله ها بررسی شده و نتیجه های حاصل بیانگر دقت مناسب این مدل در پیش بینی عملکرد رآکتور بسترسیال هستند. نتیجه های این شبیه سازی می تواند در شبیه سازی فرایندهایی که در آنها از بستر سیال استفاده می شود به کار رود.

واژه های کلیدی: شبیه سازی رآکتور، بسترسیال شده، مدل تانک های سری، مدل دینامیک دوفازی.

KEY WORDS: Reactor simulation, Fluidized bed, Sequential modular system, Dynamic two-phase.

مقدمه

پدیده های موجود در بسترسیال را می توان به دو دسته فیزیکی و شیمیایی تقسیم کرد. پدیده های فیزیکی که موردهایی مانند رفتار حباب، رفتار فازها و انتقال جرم بین فازها را شامل می شوند، به وسیله مدل های هیدرودینامیکی بیان می شوند. پدیده های شیمیایی که بیانگر واکنش های صورت گرفته در بستر هستند، به وسیله مدل های سینتیکی بیان می شوند. مدل های هیدرودینامیکی متفاوتی در منابع علمی معرفی شده اند که اکثراً بر مبنای نظریه دوفازی هستند [۱-۳]. در این نظریه رآکتور بسترسیال شده به دو فاز حباب و امولسیون تقسیم می شود. فاز حباب بخشی از بستر را که غنی از گاز است شامل می شود و فاز امولسیون بخشی از بستر است که غنی از ذرات جامد است. مدل های هیدرودینامیکی اولیه دارای فرض های ساده کننده

بسترهای سیال شده گاز-جامد کاربرد گسترده ای در صنایع شیمیایی دارند. سابقه استفاده از این بسترها به بیش از ۵۰ سال می رسد. از جمله موردهای کاربرد بسترهای سیال شده در صنایع شیمیایی استفاده از آنها به عنوان رآکتور است. با کشف پدیده سیال سازی و مشخص شدن مزایای این روش نسبت به سایر روش های تماس گاز-جامد، به تدریج بسیاری از فرایندهایی که بر مبنای تماس فازهای گاز-جامد هستند مانند خشک کن ها، واحدهای گرانشول سازی و رآکتورهای کاتالیستی گاز-جامد، با بسترهای سیال شده جایگزین شده اند. گسترش کاربرد این نوع بسترها و لزوم شناخت پدیده های واقع شده در آنها زمینه تحقیقات بسیاری در دهه های اخیر بوده است [۱]. حتی امروزه انجام تحقیقات در این زمینه از نظر صنعتی و دانشگاهی حایز اهمیت است.

+ E-mail: mostoufi@ut.ac.ir

*عهده دار مکاتبات

استفاده قرار می‌گیرند به‌طور کامل قابل تفکیک نیستند یک مدل مناسب باید بتواند در پیش‌بینی عملکرد راکتور بسترسیال شده در سرعت‌های متفاوت گاز سیال کننده (رژیم‌های متفاوت سیال سازی) معتبر باشد.

ج) برای شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی از نرم‌افزارهای شبیه ساز فرایند استفاده می‌شود. تمامی نرم افزارهای شبیه‌ساز فرایند دارای مدول‌های^(۱) استاندارد برای شبیه‌سازی واحدهای عملیاتی هستند. راکتور بسترسیال شده در هیچ یک از نرم‌افزارهای شبیه سازی به صورت روال استاندارد تعریف نشده و به صورت استاندارد نمی‌توان از این واحدهای عملیاتی در نرم افزارهای شبیه‌سازی استفاده کرد. از این جهت باید مدلی ارائه شود که این مدل افزون بر دو ویژگی قبلی، توانایی به کارگیری در چنین نرم افزارهایی را نیز داشته باشد. همچنین مدل مناسب و قابل کاربرد در این نرم‌افزارها باید دارای این قابلیت باشد که به راحتی بتوان از ترکیب روال‌های استاندارد موجود در این نرم افزار راکتور بسترسیال را شبیه‌سازی کرد.

در کلیه نرم افزارهای شبیه‌ساز فرایند مدول‌های استاندارد برای شبیه‌سازی راکتورهای شیمیایی مانند راکتورهای ساده، راکتور جریان‌قالبی یا راکتورهای به‌طور کامل آمیخته وجود دارد. در این مقاله هدف ارائه روشی است که به راحتی بتوان راکتورهای بسترسیال شده را با ترکیب مدول‌های استاندارد راکتور موجود در نرم افزارهای شبیه ساز فرایند، شبیه‌سازی کرد. شبیه‌سازی بسترهای سیال شده توسط افراد متفاوت انجام شده است. کار انجام شده در این مقاله از تمام مدل‌های قبلی به دلایل زیر کامل‌تر است:

الف) در این کار مدل دوفازی برای شبیه‌سازی راکتور بستر سیال مورد استفاده قرار گرفته است در حالی که در کارهای قبلی بیشتر از مدل‌های تک فازی یا دوفازی ساده استفاده شده است. واضح است که مدل دوفازی با واقعیت‌های فیزیکی بستر مطابقت بیشتری دارد.

ب) کارهای قبلی مطالعات موردی بوده‌اند اما در این مقاله سعی بر ارائه یک مدل عمومی برای شبیه‌سازی کلیه راکتورهای بستر سیال بوده است.

ج) کارهای قبلی انجام شده اغلب نیازمند تخصص بالا در استفاده از نرم افزارهای شبیه سازی بوده ولی با استفاده از مدل ارائه شده در این مقاله شبیه سازی راکتورهای بستر سیال برای

بسیاری بودند برای مثال، از وجود ذره‌های جامد در فاز حباب صرف نظر کرده یا فاز امولسیون در شرایط حداقل سیال‌سازی در نظر گرفته می‌شد [۳-۱]. اما تحقیقات بعدی نشان داد که واقعیت پدیده‌های واقع شده در بسترهای سیال شده با این فرضیات ساده به‌طور کامل متفاوت است [۸-۴]. تحقیقات بسیاری در زمینه هیدرودینامیک بسترهای سیال شده صورت گرفته که منجر به ارائه مدل‌های متعددی جهت بیان هیدرودینامیک چنین بسترهایی شده است [۳-۱]. اعتبار این مدل‌ها در تخمین پارامترهای هیدرودینامیکی، در شرایط متفاوت عملیاتی و در سرعت‌های متفاوت گاز سیال کننده و رژیم‌های متفاوت سیال‌سازی با یکدیگر متفاوت است. مدل‌های ارائه شده اخیر با در نظر گرفتن فرضیات مناسب در تخمین پارامترهای هیدرودینامیکی از اعتبار بالایی برخوردار هستند، افزون بر آن می‌توان از این مدل‌ها در رژیم‌های متفاوت سیال‌سازی و در گستره وسیعی از سرعت گاز سیال کننده استفاده کرد [۱۲-۹].

افزایش ابعاد واحدهای عملیاتی از مقیاس آزمایشگاهی به مقیاس صنعتی و بهینه سازی و کنترل کارکرد این واحدها نیازمند مدل‌سازی و شبیه‌سازی واحدهای عملیاتی است. در مدل‌سازی یک راکتور بسترسیال شده مدل‌های هیدرودینامیکی و مدل‌های سینتیکی با هم و به‌طور هم‌زمان حل می‌شوند. یک مدل مناسب برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی راکتور بسترسیال شده باید دارای ویژگی‌های زیر باشد:

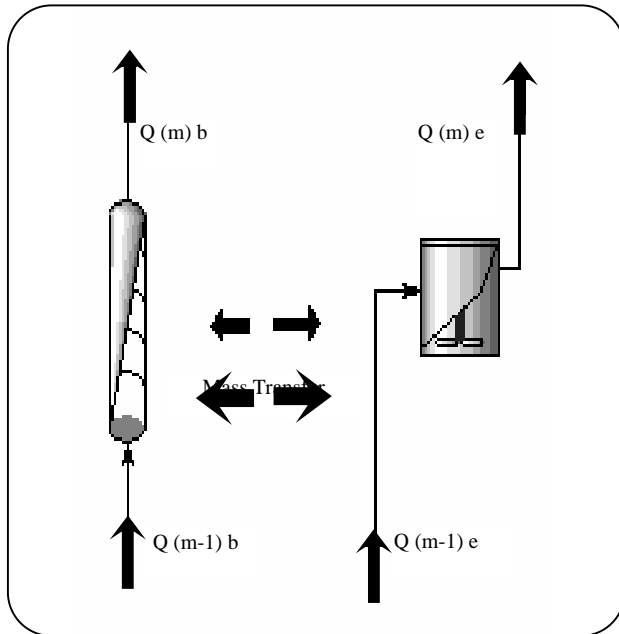
الف) سیستم‌های گاز-جامد مورد استفاده در راکتورهای بسترسیال شده با توجه به مواد شرکت کننده در واکنش و نوع ذره‌های جامد، دارای ویژگی‌های فیزیکی متفاوتی می‌باشند. تفاوت سیستم‌ها را می‌توان با مقایسه پارامترهایی مانند عدد ارشمیدس، سرعت حداقل سیال‌سازی و سرعت انتقال از یک رژیم سیال‌سازی به رژیم سیال‌سازی دیگر بررسی کرد. مدل مناسب باید در پیش‌بینی عملکرد راکتور بسترسیال شده در سیستم‌های متفاوت گاز-جامد از اعتبار بالایی برخوردار باشد.

ب) سیستم‌های متفاوت گاز-جامد با توجه به ویژگی‌های فیزیکی بستر با تغییر سرعت گاز سیال کننده رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهند. این رفتارهای متفاوت تحت عنوان رژیم‌های سیال‌سازی بیان می‌شوند. اغلب مدل‌های ارائه شده تنها در یک رژیم سیال‌سازی خاص معتبر هستند [۱۲-۹]. از آنجا که رژیم‌های سیال‌سازی که راکتورهای بسترسیال در آنها مورد

(۱) Modoul

جدول ۱- تعداد قسمت‌های بستر سیال کننده در شرایط متفاوت کارکرد بستر.

تعداد قسمت‌های بستر n	گروه بدون بعد Ha^*U/U_{mf}
۱	$11/1 < Ha^*U/U_{mf}$
۲	$5/62 < Ha^*U/U_{mf} < 11/1$
۳	$0/63 < Ha^*U/U_{mf} < 5/62$
۴	$Ha^*U/U_{mf} < 0/63$



شکل ۱- نمای شماتیک قسمت mام مدل ارائه شده.

لوشیپیل [۱] بیان می‌شود.

(۸) پارامترهای هیدرودینامیکی (تخلخل در فاز حباب و امولسیون) با استفاده از مدل دینامیک دوفازی بر مبنای اعتبار این مدل در مقایسه با سایر مدل‌های هیدرودینامیکی موجود محاسبه شده اند [۹-۱۲]. در این مدل فاز حباب هم مانند فاز امولسیون دارای ذرات جامد است و جریان گاز در فاز امولسیون می‌تواند بیشتر از حالت حداقل سیال سازی باشد [۱۳].

(۹) از تغییرهای دما در طول راکتور بسترسیال شده صرف نظر می‌شود. به این ترتیب کلیه ویژگی‌های فیزیکی و ثابت سرعت واکنش در طول راکتور ثابت باقی می‌ماند.

(۱۰) از تغییرهای غلظت در جهت شعاعی در راکتور صرف نظر می‌شود.

هر مهندس فرایند با تسلط معمولی بر چنین نرم افزارهایی امکان پذیراست.

معرفی مدل

مدل ارائه شده در این مقاله بر مبنای فرضیه‌های زیر شکل یافته است:

(۱) بستر سیال شده به تعدادی قسمت با اندازه‌ی برابر تقسیم شده‌است. تعداد قسمت‌ها با استفاده از جدول ۱ مشخص می‌شود. در این جدول عدد بدون بُعد J برای محاسبه تعداد قسمت‌ها معرفی شده است. عدد بدون بُعد J ترکیبی است از عدد Ha ، سرعت سیال سازی و سرعت حداقل سیال سازی. با توجه به روابط مورد استفاده برای محاسبه این متغیرها این عدد نسبت به تغییر اندازه‌ی ذره‌ها و رژیم‌های سیال سازی حساس است. زیاد بودن این عدد بدون بعد به معنی سرعت بالای سیال سازی نسبت به حداقل سیال سازی (U_0/U_{mf} زیاد) یا سریع تر بودن سرعت واکنش نسبت به انتقال جرم (Ha زیاد) است. در هر دو این حالت رفتار بستر سیال به راکتور مخلوط ایده آل^(۱) نزدیک می‌شود و با کم شدن این مقادارها رفتار بستر به راکتور جریان قالبی^(۲) نزدیک تر می‌شود. بنابراین، با استفاده از گروه بدون بُعد J و جدول ۱ می‌توان رفتار بستر واقعی را که بین این دو راکتور ایده آل قرار دارد را تعیین کرد. نمای شماتیک این مدل برای قسمت m ام را می‌توان در شکل ۱ مشاهده کرد.

(۲) هر یک از قسمت‌ها شامل دو فاز حباب و فاز امولسیون است.

(۳) جریان گاز در فاز حباب به صورت جریان به‌طور کامل قالبی فرض شده‌است. بر این اساس واکنش در فاز حباب با استفاده از راکتور با جریان قالبی مدل می‌شود.

(۴) قطر حباب‌ها در طول بستر ثابت فرض شده اند، همچنین فرض شده است که حباب‌ها پس از تشکیل به سرعت به اندازه‌ی ثابت می‌رسند.

(۵) میزان تخلخل فاز حباب و فاز امولسیون در طول بستر ثابت فرض شده است.

(۶) الگوی جریان در فاز امولسیون به صورت کامل آمیخته در نظر گرفته می‌شود. بر این اساس واکنش در فاز امولسیون با استفاده از یک راکتور جریان آمیخته مدل شده است.

(۷) انتقال جرم بین دو فاز با استفاده از نظریه‌ی کانی و

(۱) Continuously Stirred Tank Reactor (CSTRS)

(۲) Plug Flow Reactor (PFR)

$$D_{bo} = 0.8713 \left(\frac{A(U_o - U_{mf})}{N_D} \right)^{0.4} \quad (5)$$

$$D_{bm} = 1.6377 (A(U_o - U_{mf}))^{0.4} \quad (6)$$

$$D_b = D_{bm} - (D_{bm} - D_{bo}) \exp \left(-0.15 \frac{h_{mf}}{D_r} \right) \quad (7)$$

با توجه به اینکه بستر به n قسمت برابر تقسیم شده است، حجم هر بخش $V_m = \frac{V_t}{n}$ خواهد بود. در این صورت حجم فاز حباب و امولسیون در هر بخش برابر خواهد بود با:

$$V_{b_m} = V_m d \quad (8)$$

$$V_{e_m} = V_m (1-d) \quad (9)$$

و حجم راکتور پلاگ به طور کامل آمیخته با استفاده از رابطه‌های زیر محاسبه خواهند شد.

$$V_{PFR_m} = V_{b_m} e_b \quad (10)$$

$$V_{CSTR_m} = V_{e_m} e_e \quad (11)$$

پارامترهای هیدرودینامیکی با استفاده از مدل دینامیک دوفازی محاسبه می‌شوند [۱۳].

$$f = A_{f(1)} + A_{f(2)} \exp \left(\frac{-(U_o - U_{mf})}{A_{f(3)}} \right) \quad (12)$$

$$e_b = A_{void-b(1)} + A_{void-b(2)} \exp \left(\frac{-(U_o - U_{mf})}{A_{void-b(3)}} \right) \quad (13)$$

$$e_e = A_{void-e(1)} + A_{void-e(2)} \exp \left(\frac{-(U_o - U_{mf})}{A_{void-e(3)}} \right) \quad (14)$$

$$d = 1-f \quad (15)$$

ثابت‌های مورد استفاده برای محاسبه مقادیرهای ε_b ، ε_e و f که به ترتیب مربوط به تخلخل در فاز حباب، تخلخل در فاز امولسیون و جزء حجمی فاز امولسیون است، برای مدل دینامیک دوفازی توسط کویی و همکاران [۱۳] ارائه شده‌اند که این مقادیر در جدول ۲ خلاصه شده‌اند. برای محاسبه ضریب انتقال جرم از رابطه‌های ارائه شده توسط کانی و لوشیپیل استفاده می‌شود [۱].

$$\frac{1}{K_{be}} = \frac{1}{K_{bc}} + \frac{1}{K_{ce}} \quad (16)$$

$$K_{bc} = 4.5 \left(\frac{U_e}{D_b} \right) + 5.85 \left(\frac{D_{AB} \frac{0.5 \cdot 0.25}{g}}{D_b^{5/4}} \right) \quad (17)$$

با توجه به فرضیه‌های مدل، راکتور بستریال به n قسمت برابر تقسیم می‌شود. تعداد قسمت‌ها با استفاده از جدول ۱ مشخص می‌شود. در این جدول با توجه به گروه بدون بعد HaU/U_{mf} تعداد قسمت‌های بستر مشخص می‌شود. گروه بدون بعد به گونه ای تعیین شده که بتواند معرف ویژگی‌های فیزیکی بستر باشد و از طرفی نسبت به تغییر رژیم سیال سازی با توجه به افزایش سرعت گاز سیال کننده حساس باشد.

واکنش در فاز گاز فرض شده است و سرعت واکنش‌ها بر مبنای واحد حجم فاز گاز ارایه شده است. هر یک از فازهای حباب و امولسیون دارای ذره‌های جامد هستند، به همین دلیل حجم مفید به کار رفته برای راکتورهای مورد استفاده حجم فاز گاز در هر فاز در نظر گرفته شده است. با توجه به این که مدل سازی در حالت پایا انجام می‌شود موازنه جرم حول هریک از فازها را می‌توان به صورت زیر نوشت:

موازنه جرم در فاز حباب:

$$C_{Ab_{m-1}} U_b A_b - r_{A_m} V_{PFR_m} - K_{be} (C_{Ab_m} - C_{Ae_m}) V_{b_m} - C_{Ab_m} U_b A_b = 0 \quad (1)$$

موازنه جرم در فاز امولسیون:

$$C_{Ae_{m-1}} U_e A_e - r_{A_m} V_{CSTR_m} + K_{be} (C_{Ab_m} - C_{Ae_m}) \left(\frac{d}{1-d} \right) V_{e_m} - C_{Ae_m} U_e A_e = 0 \quad (2)$$

سرعت فاز حباب U_b از رابطه دیویسون و همکاران [۱۴] محاسبه می‌شود.

$$U_b = U_o - U_e + u_{br} \quad (3)$$

$$u_{br} = 0.711 \sqrt{g D_b} \quad (4)$$

برای محاسبه D_b که قطر میانگین حباب در بستر است از رابطه موروی و ون [۱۵] استفاده می‌شود. از آنجا که تغییر قطر حباب‌ها به طور معمول تا فاصله کمی از سطح توزیع کننده گاز صورت می‌گیرد، از این بخش کوتاه صرف نظر شده و در مدل استفاده شده برای محاسبه قطر حباب با در نظر گرفتن به هم پیوستن و شکست حباب‌ها قطری میانگین برای حباب در طول بستر استفاده شده است.

جدول ۳- ویژگی های سیستم های تجربی استفاده شده در مدل سازی رآکتور بستر سیال شده.

Parameter	Unit	Grace & Sun [۱۶]	Heidel et al. [۱۷]	Fryr & Potter [۱۸]
D_r	m	۰/۱	۰/۰۷۵	۰/۲۲۹
H	m	۲	۰/۲۶	۲
d_p	μm	۶۰	---	۱۱۷
ρ_s	kg/m^3	۱۵۸۰	---	۲۶۵۰
U_{mf}	m/s	۰/۰۰۲۶	۰/۰۱۱	۰/۰۱۷
U_c [۱۹]	m/s	۰/۶۵۰۲	۰/۷۵	۱/۴۱۸۲
ϵ_{mf}	-	۰/۴۷۵	۰/۵	۰/۴۸
Geldart	-	A	A	B

و نتیجه های حاصل از مدل سازی است. در این رآکتور ازن به اکسیژن تجزیه می شود، که یک واکنش درجه اول بر مبنای ازن است و گاز سیال کننده بستر هوا است. با مقایسه نتیجه های تجربی و نتیجه های حاصل از مدل سازی، می توان گفت مدل مورد بحث در این مقاله در پیش بینی درصد تبدیل رآکتور از نتیجه های خوبی برخوردار است، هر چند تفاوتی میان نتیجه های حاصل از مدل سازی و نتیجه های تجربی مشاهده می شود. اطلاعات تجربی ارائه شده توسط سان و گریث [۱۷] در برگیرنده گستره وسیعی از سرعت گاز سیال کننده از سرعت حداقل سیال سازی تا سرعت هایی بالاتر از سرعت سیال سازی درهم است. مقایسه نتیجه های حاصل از مدل سازی با اطلاعات تجربی نشان دهنده آن است که مدل مورد بحث می تواند در رژیم های متفاوت سیال سازی و در سرعت های متفاوت گاز سیال کننده رفتار رآکتور را به خوبی پیش بینی کند. حداکثر خطای مشاهده شده ۲۰ درصد می باشد. به طور کلی مشاهده می شود که، با افزایش سرعت واکنش، تفاوت میان نتیجه های حاصل از مدل سازی با داده های تجربی ارائه شده افزایش می یابد. با افزایش سرعت واکنش هیدرودینامیک بستر سیال شده نقش بیشتری در تعیین عملکرد رآکتور بستر سیال شده ایفا می کند چرا که در سرعت های بالای واکنش با توجه به این که کنترل کننده واکنش، پارامترهای هیدرودینامیکی است، هر چه مدل هیدرودینامیکی تخمین مناسب تری از پارامترهای هیدرودینامیکی موثر در عملکرد مدل مانند تخلخل در فاز حباب ϵ_b ، تخلخل در فاز امولسیون ϵ_e و

جدول ۲- مقدارهای ثابت های مورد استفاده در مدل دینامیک دو فازی [۱۳].

ثابت ها	FCC	Sand
$A_{f(1)}$	۰	۰/۴۶۶
$A_{f(2)}$	۱	۰/۵۳۴
$A_{f(3)}$	۰/۶۲	۰/۴۱۳
$A_{vod-b(1)}$	۰/۷۸۴	۱
$A_{vod-b(2)}$	-۰/۱۳۹	-۰/۱۴۶
$A_{vod-b(3)}$	۰/۲۷۲	۴/۴۳۹
$A_{vod-e(1)}$	ϵ_{mf}	$\epsilon_{mf} + ۰/۲$
$A_{vod-e(2)}$	۰/۰۰۰۶۱	-۰/۰۵۹
$A_{vod-e(3)}$	-۰/۲۶۲	۰/۴۲۹

$$K_{ce} = 6/77 \left(\frac{D_{AB} e_e u_{br}}{D_b^3} \right)^{0.5} \quad (۱۸)$$

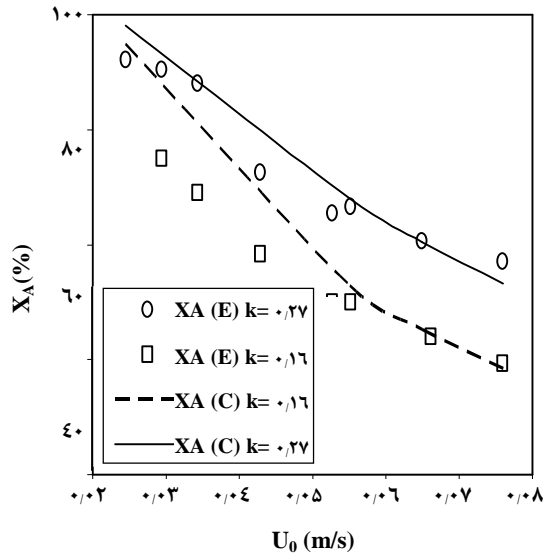
که در این رابطه ها K_{bc} ضریب انتقال جرم از فاز حباب به فاز ابر و K_{ce} ضریب انتقال جرم از فاز ابر به فاز امولسیون است.

برای شبیه سازی رآکتور بستر سیال به صورت زیر عمل می شود. با توجه به ویژگی های فیزیکی بستر و سرعت گاز سیال کننده مقدار عددی گروه بدون بُعد محاسبه می شود. سپس با استفاده از جدول ۱ تعداد قسمت ها مشخص می شود. مشخص شدن تعداد قسمت ها بیانگر آن است که چند گروه رآکتور شامل رآکتورهای CSTR و PFR باید مورد استفاده قرار گیرند. به این تعداد مدول رآکتور در نرم افزار شبیه ساز نصب می شود و اطلاعات مورد نیاز نرم افزار برای صفر شدن درجه آزادی و حل مدول به وسیله نرم افزار با استفاده از رابطه های (۳) تا (۱۸) محاسبه می شود.

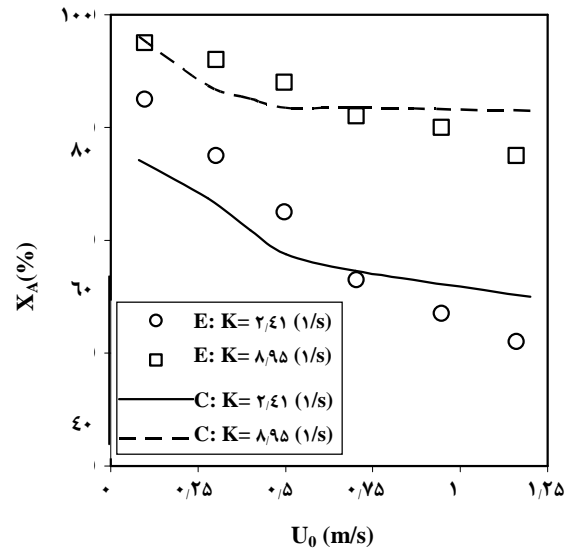
نتیجه ها و بحث

برای تعیین اعتبار مدل در شبیه سازی رآکتورهای بستر سیال شده از مجموعه اطلاعات تجربی ارائه شده در مقاله ها استفاده شده است. ویژگی های سیستم های متفاوت استفاده شده در جدول ۳ خلاصه شده است. نتیجه های مدل سازی رآکتور بستر سیال در شکل های ۲ تا ۴ نمایش داده شده اند.

شکل ۲ نشان دهنده تغییرهای درصد تبدیل ازن در رآکتور بستر سیال شده با تغییرهای سرعت گاز سیال کننده در ثابت های متفاوت سرعت واکنش با استفاده از اطلاعات سان و گریث [۱۶]



شکل ۲- تغییرهای درصد تبدیل اتیلن با تغییرهای سرعت گاز سیال کننده در رآکتور بستر سیال شده هیدروژن دار کردن اتیلن، (C) نتیجه‌های حاصل از مدل سازی، (E) نتایج اطلاعات تجربی براساس اطلاعات هیدل و همکاران [۱۷].



شکل ۳- تغییرهای درصد تبدیل ازن با تغییرهای سرعت گاز سیال کننده در رآکتور بستر سیال شده تجزیه ازن، (C) نتیجه‌های حاصل از مدل سازی، (E) نتیجه‌های اطلاعات تجربی براساس اطلاعات سان و گریث [۱۶].

نتیجه‌های حاصل از مدل‌سازی بیشتر از نتیجه‌های تجربی محاسبه می‌شود.

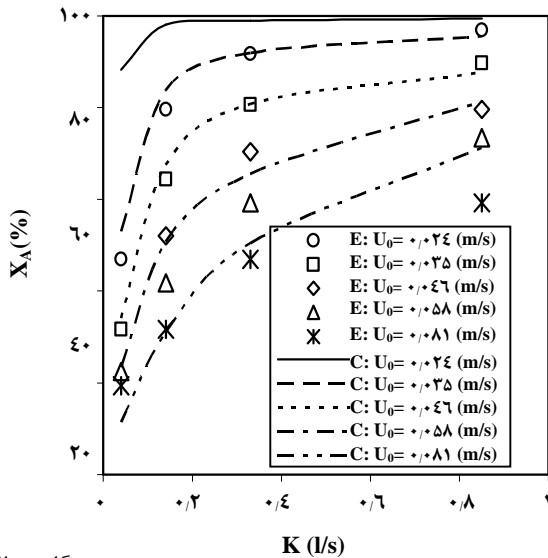
بررسی مدل دینامیک دوفازی نشان می‌دهد که برای محاسبه ثابت‌های مورد استفاده در رابطه‌های ارایه شده در این مدل (رابطه‌های ۱۲ تا ۱۵) که در جدول ۲ خلاصه شده‌اند، آزمایش‌هایی با استفاده از ذرات جامد نماینده گروه A گذارت^(۱) انجام شده که ویژگی‌های مورد استفاده در آن آزمایش‌ها که منجر به اعداد جدول ۲ برای ذرات A گذارت شده است با ویژگی‌های سیستم‌های تجربی مورد استفاده در این مقاله متفاوت است. این تفاوت را می‌توان با مقایسه حداقل سرعت سیال‌سازی میان سیستم‌های متفاوت گاز-جامد یا مقدارهای عدد ارشمیدس محاسبه شده برای هر یک از سیستم‌های گاز-جامد مشاهده کرد. از آنجایی که ضریب‌های معادله‌های مدل دینامیک دوفازی با تغییر سیستم گاز-جامد تغییری نمی‌کند مدل دینامیک دوفازی برای تخمین پارامترهای هیدرودینامیکی نسبت به تغییر سیستم گاز-جامد حساس نیست. به این علت پارامترهای هیدرودینامیکی سیستم متفاوت از مقدارهای واقعی آن محاسبه شده و تفاوت میان نتیجه‌های حاصل از مدل‌سازی با نتیجه‌های تجربی مشاهده می‌شود. در صورتی که مقدارهای ثابت‌ها در رابطه‌های (۱۲) تا (۱۵) در مدل دینامیک دوفازی با نوع سیستم گاز-جامد (عدد ارشمیدس)

(۱) Geldrat

جزء حجمی فاز حباب δ ارایه کند، با توجه به تاثیر مقدار صحیح این پارامترها در محاسبه حجم رآکتورهای جریان قالبی و به‌طور کامل آمیخته در فازهای حباب و امولسیون، نتیجه‌های حاصل از مدل‌سازی تطابق بهتری با نتیجه‌های تجربی خواهند داشت.

شکل ۳ نشان‌دهنده تغییرهای درصد تبدیل اتیلن در رآکتور بسترسیال شده با تغییر سرعت گاز سیال کننده در ثابت‌های متفاوت سرعت واکنش بر مبنای اطلاعات تجربی هیدل و همکاران [۱۷] و نتیجه‌های حاصل از مدل‌سازی است. در رآکتور مورد بررسی در این سیستم، اتیلن در مجاورت مقدار اضافی از هیدروژن، هیدروژنه شده و به اتان تبدیل می‌شود. به علت وجود مقدار اضافی از هیدروژن، واکنش نسبت به اتیلن از درجه اول بوده و گاز سیال کننده هیدروژن است. مطالب گفته شده در مورد شکل ۲ در این شکل نیز درست است. نتیجه‌های حاصل از مدل‌سازی از دقت مناسبی برخوردار هستند، هرچند برخلاف نتیجه‌های به‌دست آمده در شکل ۲ مدل درصد تبدیل را بیشتر از نتیجه‌های تجربی محاسبه می‌کند.

با بررسی رابطه‌های ۱۲ تا ۱۵ می‌توان گفت در مدل دوفازی دینامیک مقدارهای تخلخل در فاز حباب و فاز امولسیون بیشتر از مقدار واقعی تخمین زده می‌شوند، به این ترتیب مقدارهای حجم رآکتورها در دوفاز و تعداد قسمت‌های بستر افزایش یافته و



شکل ۱۲- معیبرهای در صد تبدیل ازن با معیبرهای سرعت گاز سیال کننده در راکتور بستر سیال شده تجزیه ازن، (C) نتیجه‌های حاصل از مدل سازی، (E) نتیجه‌های اطلاعات تجربی براساس اطلاعات فریر و پاتر [۱۸].

(۱۲) تا (۱۵) برای ذره‌های B گلدارت بر مبنای سیستم گاز-جامدی متفاوت از سیستم‌های مورد استفاده در این مقاله تعیین شده اند. در سیستم گاز - جامدی که سرعت حداقل سیال سازی کمتر از سیستمی که آزمایش‌های مدل دوفازی دینامیک روی آن انجام شده است، به علت آنکه طبق رابطه‌های (۱۴) تا (۱۷) مقدارهای تخلخل در فاز امولسیون و حباب بیشتر از مقدار واقعی محاسبه می‌شوند، پس مقدار حجم راکتورها بیشتر از مقدار واقعی محاسبه می‌شود و درصد تبدیل بیشتر از نتیجه‌های تجربی محاسبه می‌شود.

نتیجه گیری

با توجه به کلیه مطالب گفته شده و مقایسه نتیجه‌های حاصل از مدل سازی با نتیجه‌های تجربی، مدل اریه شده در این مقاله مدلی معتبر در پیش‌بینی رفتار راکتور بستر سیال می‌باشد و هم‌چنین دارای ویژگی‌های زیر است:

(۱) برای کلیه سیستم‌های گاز - جامد اعم از ذره‌های گروه A و گروه B گلدارت معتبر است.
 (۲) در سرعت‌های متفاوت گاز سیال کننده یا رژیم‌های متفاوت سیال سازی معتبر است.

(۳) تئوری مدل به گونه‌ای است که استفاده از این مدل برای شبیه‌سازی راکتورهای بسترسیال شده در نرم افزارهای شبیه‌ساز

مرتبط باشد، این مدل می‌تواند تخمین بهتری از پارامترهای هیدرودینامیکی سیستم (تخلخل فاز حباب و امولسیون) ارائه دهد [۱۰].

در سیستم مورد استفاده به‌وسیله فریر و پاتر [۱۸]، رفتار ذره‌های جامد مانند رفتار ذره‌های جامد گروه B گلدارت است. شکل ۴ نمایش دهنده تغییرهای درصد تبدیل ازن در راکتور بسترسیال شده در سرعت‌های متفاوت از گاز سیال کننده و ثابت‌های متفاوت سرعت واکنش بر مبنای اطلاعات تجربی حاصل از فریر و پاتر [۱۸] و نتیجه‌های حاصل از مدل سازی است. در این راکتور واکنش تجزیه ازن انجام می‌گیرد که واکنش درجه اول بر مبنای ازن و گاز سیال کننده هوا است.

نتیجه‌های حاصل از مدل سازی، بیانگر آن است که مدل در پیش‌بینی عملکرد راکتور بسترسیال برای ذره‌های گروه B گلدارت در بیشتر موارد و در غیر شرایط حدی از دقت قابل قبولی برخوردار است. مقایسه نتیجه‌های حاصل از مدل سازی با نتیجه‌های تجربی نشان دهنده تفاوتی است که علت این تفاوت را می‌توان به شرح زیر بیان کرد.

با بررسی نتیجه‌های اریه شده در شکل ۴ مشاهده می‌شود که همانند آنچه که برای ذره‌های گروه A گلدارت گفته شد، با افزایش سرعت گاز سیال کننده و افزایش ثابت سرعت واکنش تفاوت میان نتیجه‌های تجربی و مدل سازی افزایش می‌یابد، چرا که با افزایش سرعت واکنش نقش هیدرودینامیک به عنوان تعیین کننده میزان اختلاط میان فازها در پیش‌بینی عملکرد راکتور بستر سیال بیشتر شده و اندک خطای مدل هیدرودینامیکی در تعیین پارامترهای هیدرودینامیکی، در نتیجه‌های حاصل از مدل سازی بیشتر تاثیرگذار خواهد بود.

با بررسی شکل ۴ مدل مورد بحث درصد تبدیل در راکتور را بیشتر از نتیجه‌های تجربی اریه شده تخمین می‌زند. دلیل این امر را می‌توان چنین شرح داد که مدل هیدرودینامیکی دینامیک دوفازی مقدارهای تخلخل در فاز حباب و امولسیون را بیشتر از مقدار واقعی تخمین می‌زند، به همین دلیل حجم معادل راکتورهای PFR و CSTR در فازهای حباب و امولسیون، بیشتر از مقدار واقعی محاسبه شده و مدل، درصد تبدیل راکتور را بیشتر از مقدار تجربی محاسبه می‌کند. عدم محاسبه به طور کامل دقیق این مقدارها به‌وسیله‌ی مدل دوفازی دینامیک به آن علت است که همانند مطلب ذکر شده در مورد ذره‌های گروه A گلدارت مقدار ثابت‌های مورد استفاده در مجموعه رابطه‌های

D_{bm}	حداکثر قطر حباب (m)
d_p	قطر میانگین ذره‌های جامد (m)
D_{bo}	قطر اولیه حباب (m)
D_r	قطر راکتور (m)
f	جزء حجمی فاز امولسیون
g	شتاب جاذبه زمین (m/s^2)
Ha	عدد بدون بعد هاتا
h_{mf}	ارتفاع بستر در حالت حداقل سیال سازی (m)
H	ارتفاع بستر (m)
K	ثابت سرعت واکنش (1/s)
K_{bc}	ضریب انتقال جرم از فاز حباب به ابر (m/s)
K_{be}	ضریب انتقال جرم از فاز حباب به امولسیون (m/s)
K_{ce}	ضریب انتقال جرم از فاز ابر به امولسیون (m/s)
N_D	تعداد سوراخ در واحد سطح صفحه پخش کننده
r_A	سرعت واکنش بر مبنای ماده A ($Kgmole/m^3s$)
U_b	سرعت گاز در فاز حباب (m/s)
U_{br}	سرعت صعود حباب (m/s)
U_c	حداقل سرعت سیال سازی در هم (m/s)
U_e	سرعت گاز در فاز امولسیون (m/s)
U_{mf}	سرعت حداقل سیال سازی (m/s)
U_o	سرعت گاز سیال کننده (m/s)
V_b	حجم فاز حباب (m^3)
V_{CSTR}	حجم راکتور کاملاً آمیخته (m^3)
V_e	حجم فاز امولسیون (m^3)
V_{PFR}	حجم راکتور جریان قالبی (m^3)

زیر نویس ها

b	فاز حباب
e	فاز امولسیون
m	بخش m ام
فهرست علائم یونانی	
ρ_s	چگالی ذره‌های جامد (kg/m^3)
ϵ_b	تخلخل فاز حباب
ϵ_e	تخلخل فاز امولسیون
δ	جزء حجمی فاز حباب

فرایند به راحتی ممکن است. کلیه نرم افزارهای شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی دارای مدول‌های استاندارد برای شبیه‌سازی راکتور قالبی و به‌طور کامل آمیخته هستند به این ترتیب با ترکیب این مدول‌ها با توجه به روش ارائه شده در این مقاله می‌توان راکتورهای بسترسیال شده را در این دسته از نرم‌افزارها به راحتی شبیه‌سازی کرد.

مقایسه نتیجه‌های حاصل از شبیه‌سازی با اطلاعات تجربی به‌دست آمده از مقاله‌ها برای سیستم‌های متفاوت گاز-جامد نشان‌دهنده آن است که تفاوت موجود میان داده‌های تجربی با نتیجه‌های حاصل از شبیه‌سازی به این علت است که اگر چه مدل دینامیک دوفازی در تخمین پارامترهای هیدرودینامیکی (جزء حجمی فاز حباب و تخلخل فاز حباب و امولسیون) از دقت مطلوبی برخوردار است ولی از آن جا که این مدل نسبت به تغییر سیستم گاز-جامد حساس نیست و ثابت‌های مورد استفاده در این مدل که برای محاسبه این پارامترها استفاده می‌شوند برای کلیه سیستم‌های گاز-جامد یکسان می‌باشند، تفاوت میان نتیجه‌های حاصل از مدل‌سازی و نتیجه‌های تجربی مشاهده می‌شود.

اصلاح مدل دینامیک دوفازی به نحوی که مقدار ثابت‌های مورد استفاده در این مدل برای تخمین مقدار پارامترهای هیدرودینامیکی با ویژگی‌های فیزیکی سیستم (گاز - جامد) برای مثال عدد ارشمیدس مربوط باشد باعث افزایش دقت شبیه‌سازی راکتورهای بسترسیال با استفاده از مدل ارائه شده در این مقاله می‌شود.

نمادها

A	سطح مقطع (m^2)
$A_{f(1)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{f(2)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{f(3)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{Void-b(1)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{Void-b(2)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{Void-b(3)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{Void-e(1)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{Void-e(2)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
$A_{Void-e(3)}$	ثابت مورد استفاده در مدل دوفازی دینامیک
C_A	غلظت ماده A ($Kgmole/m^3$)
D_{AB}	ضریب نفوذ (m^2/s)
D_b	قطر میانگین حباب (m)

تاریخ دریافت: ۸/۴/۸۲ ؛ تاریخ پذیرش: ۲۵/۲/۸۳

مراجع

- [1] Kunni, D. and Levenspiel, O., "Fluidization Engineering", 2nd ed., Butterworth-Heinmen, Boston, (1991).
- [2] Lim, K. S., Zhu, J. X. and Grace J. R., Hydrodynamic of Gas-solid Fluidization, *Int. J. Multiphase flow*, **21**, p. 141(1995).
- [3] Bi, H., Ellis, N., Abba, I. A. and Grace, J. R., A State-of-the-art Review of Gas-solid Turbulent Fluidization, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, p. 4789 (2000).
- [4] Aoyagi, M. and Kunni, D., Importance of Dispersed Solid in Bubbles for Exothermic Reactions in Fluidized Beds, *Chem. Eng. Comm.*, **1**, p. 191 (1974).
- [5] Abrahamson, A. R. and Geldart, D., Behavior of Gas-Solid Fluidized Bed of Fine Powders: Part II, Voidage of the Dense Phase in Bubbling Beds, *Powder Technol.*, **26**, p. 47 (1980).
- [6] Batchelor, G. K. and Nitche, J. M., Explosion of Particle from Buoyant Blob in Fluidized Bed, *J. Fluid Mech.*, **278**, p. 63 (1994).
- [7] Gilbertson, M. A. and Yates, J. G., The Motion of Particles Near a Bubble in Gas-Fluizied Bed, *J. Fluid Mech.*, **323**, p. 377 (1996).
- [8] Chaouki, J., Gonzalez, A., Guy, C. and Klvana, D., Two-Phase Model for a Catalytic Turbulent Fluidized Bed Reactor: Application to Ethylene Synthesis, *Chem. Eng. Science*, **54**, p. 2039 (1999).
- [9] Jafari, R., Sotudeh-Garebagh, R. and Mostoufi, N., Performance of the Wide-Ranging Models for Fluidized Bed Reactors, *Advanced Powder Technology*, **15**, p. 533 (2004).
- [۱۰] جعفری، روزبه؛ شبیه سازی رآکتور بستر سیال تولید ملامین، پروژه کارشناسی ارشد، گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی، دانشگاه تهران. دی ماه (۱۳۸۱).
- [۱۱] جعفری، روزبه؛ ستوده قره باغ، رحمت؛ مستوفی، نوید؛ مقایسه مدل های هیدرودینامیکی دوفازی در پیش بینی عملکرد رآکتور بسترسیال شده تجزیه ازن، مجموعه مقاله های هفتمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران، جلد ۴، صفحه ۴۱۲، (۱۳۸۱).
- [12] Mostoufi, N., Cui, H., Chaouki, J., A Comparision of Two and Single-Phase Models for Fluidized Bed Reactors, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **40**, p. 5526 (2002).
- [13] Cui, H., Mostoufi, N. and Chaouki, J., Characterization of Dynamic Gas-Solid Distribution in Fluidized Bed, *Chem. Eng. J.*, **79**, p. 133 (2000).
- [14] Davidson J. F., and Harrison D., "Fluidized Particles", Cambridge University Press, New York, (1963).
- [15] Mori S. and Wen C. Y., Estimation of Bubble Diameters in Gaseous Fluidized Beds, *AIChE J.*, **21**, p. 109 (1975).
- [16] Grace, J. R. and Sun, G., Influence of Particle Size Distribution on the Performance of

- Fluidized Bed Reactor, *Canadian J. Chem. Eng.*, **69**, p. 1126 (1991).
- [17] Heidel, K., Schugerl, K., Fetting F., and Schiemann G., Einfluß von Mischungsvorgängen auf den Umsatz bei der Äthylenhydrierung in fließbetten, *Chem. Eng. Sci.*, **20**, p. 557 (1965).
- [18] Fryer, C. and Potter, O. E., Experimental Investigation of Model for Fluidized Bed Catalytic Reactors, *AIChE J.*, **22**, p. 38 (1976).
- [19] Bi, H., Grace, J. and Lim K. S., Transition from Bubbling to Turbulent Fluidization, *Ind. Eng. Chem. Res. Dev.*, **34**, p. 4003 (1995).