

Amirkabir Journal of Mechanical Engineering

Amirkabir J. Mech. Eng., 56(4) (2024) 517-542 DOI: 10.22060/mej.2024.22927.7693

Hydrodynamic investigation of industrial gas-phase polyethylene reactors in two different technologies

Peyman Karimzadeh Soureshjani, Hamidreza Norouzi*

Center of Engineering and Multiscale Modeling of Fluid Flow (CEMF), Faculty of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran.

ABSTRACT: Gas-solid fluidized bed reactors are among the common methods to produce linear lowdensity polyethylene. The contact quality between the two phases and the mixing of the solid particles in these reactors have significant impacts on the polymerization reaction. In this research, the hydrodynamic behaviour of two reactors licensed by Basell and Mitsui companies was investigated using computational fluid dynamics. Two-fluid model with the kinetic theory of granular flow was used. The model was first validated using experimental data, and then the analyses of the Mitsui and Basell industrial reactors were carried out. The results showed that the uniformity of the gas phase volume fraction, which indicates the quality of the gas-solid contact, increases with the distance from the bed bottom in both reactors so that at a normalized height of 0.96, the phase homogeneity reaches its maximum. At this height, the coefficient of variations of volume fraction in the Basell and Mitsui reactors are 0.4% and 1.3%, respectively, and the phase homogeneity in the Mitsui reactor is always higher than that in the Basell reactor at different heights, indicating a better contact between particles and gas. The time-averaged axial velocity of the solid particles at different heights showed that the intensity of solid particle movement is higher in the Basell reactor, so that at a normalized height of 0.72, the axial velocity of the solid particles in the Basell reactor is approximately 2 m/s, while it is approximately 1 m/s in the Mitsui reactor. Considering the axial velocity parameter, it can be concluded that the quality of solid particle mixing in the Basell reactor is higher than that in the Mitsui reactor.

1-Introduction

Polyolefins are widely used in various industries. Polyethylene is the most extensively produced polyolefin, with production methods categorized into high- and lowpressure processes. Low-pressure gas-phase processes employing fluidized-bed reactors are commonly used[1-2].

Various reactor configurations have been developed by different licensors, with the Basell and Mitsui technologies being widely used. While the overall reaction conditions are similar, differences in reactor configuration details can impact the hydrodynamics, such as solid particle mixing and gas-solid contact, which are critical in reactor performance.

The hydrodynamics of gas-solid fluidized bed reactors can be studied using two main numerical modeling approaches: Euler-Lagrange and Euler-Euler. Due to the significantly higher computational requirements of the Euler-Lagrange method, it is not used for simulating industrial-scale fluidized bed reactors[3].

Many studies have investigated fluidized bed hydrodynamics, including a recent investigation [4] on the effect of gas distributor design on bubble behaviour in a lab**Review History:**

Received: Jan. 15, 2024 Revised: Jun. 14, 2024 Accepted: Jul. 10, 2024 Available Online: Aug. 19, 2024

Keywords:

Computational Fluid Dynamic Ethylene Polymerization Eulerian Modelling Fluidized Bed Reactor OpenFOAM

scale fluidized bed. However, the hydrodynamic simulation of fluidized bed reactors has rarely been examined under industrial operating conditions. Most of the existing studies have been conducted on a laboratory scale and do not focus on a specific technology. Furthermore, there is a lack of research that compares the different reactor configurations and their effects on the reactor hydrodynamics.

This paper aims to investigate the hydrodynamics of two industrial reactors with distinct configurations using CFD tools. First, a suitable model is developed and validated. Subsequently, a comparative analysis of the hydrodynamic performance of the two reactors is performed using the developed hydrodynamic model.

2- Methodology

To simulate a two-phase system using the Eulerian model, the time-averaged conservation equations for mass and linear momentum are considered for each phase [5]. In addition to the primary conservation equations, the model incorporates equations describing the interactions between particle-gas, particle-particle, and particle-wall [6]. For the Eulerian

*Corresponding author's email: h.norouzi@aut.ac.ir



Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode.

Table 1. Closure models used in the hydrodynamic model

Model	Reference
Viscosity Model	Gidaspow [7]
Conductivity Model	Gidaspow [7]
Granular Pressure Model	Lun [6]
Frictional Stress Model	Johnson Jackson Schaeffer [8]
Radial Distribution	Sinclair Jackson[9]
Function	Silleunsuekson[5]
Drag Model	Syamlal Obrien [10]



Fig. 1. Contour of volume fraction of particles obtained from the simulation of the industrial reactor at t=30 s

simulation, a suitable rheological model is required to capture the behaviour of the solid phase as a fluid-like material. In this study, the KTGF model is employed to express the aforementioned interactions [7]. The sub-models used to develop the hydrodynamic model are given in Table 1.

For simulating the industrial reactors, due to the very high volume of industrial reactors, the dimensions of the reactor were scaled down 4 times, but the properties of phases and superficial gas velocity and pressure were kept constant. General configurations of both reactors and the field of volume fraction of particles obtained from the simulation are shown in Figure 1.

Simulations were performed by OpenFOAM v-9 on a computer with 24 CPU cores. multiphaseEulerFoam solver was used for simulations and each simulation of the reactor took around 5 to 7 days to complete (30 seconds).

3- Result and Discussion

To perform a mesh independency study, the time-averaged volumetric fraction of the solid phase was investigated along



Fig. 2. Comparison of the size distribution of bubbles at a height of 90 mm from the bottom of the bed and a velocity of 3.4 times the minimum fluidization velocity between simulation and experimental data [11]



Fig. 3. Comparison of the CoV related to the time-averaged volume fraction of the gas phase

the reactor's axial direction. After further investigation, a cell size of 10 times of particle diameter was selected (results are not shown here).

After the mesh independence study, the hydrodynamic model was validated using experimental data available in Busciglio et al. [11]. One of the critical aspects in the behaviour of bubbling fluidized bed reactors is the investigation of bubble characteristics, including bubble rise velocity and bubble size distribution. In this study both were studied and as an example bubble size distribution at a bed height of 90 mm and gas velocity 3.4 times the minimum fluidization velocity is shown in Figure 2. The simulation could accurately predict the bubble size distribution obtained from experimental measurements.

Figure 3 shows the coefficient of variation of gas volume fraction (CoV) versus bed normalized height in both reactors. If Cov is reduced, the quality of gas-solid contact is increased. The gas-solid contact quality in Mitsui technology is higher than in Basell technology, and this quality also increases with the distance from the bottom of the bed (Figure 3). Therefore,



Fig. 4. Comparison of the time-averaged solid phase velocity (from 10 to 30 seconds) in the axial direction and at a normal height of 0.72.

the presence of the stirrer improves the quality of gas-solid contact and the uniformity of the flow of the two phases.

For evaluating the intensity of the solid mixing, axial solid velocity was considered. According to the value of the velocities, it can be seen that at a normal height of 0.72 (Figure 4), the maximum velocity of solid particles in the Basell reactor is almost twice the solid particle velocity in the Mitsui reactor.

Therefore, this higher velocity of solid particles in Basell technology indicates more mixing of solid particles in this reactor.

4- Conclusion

The study investigated the hydrodynamics in industrial fluidized bed reactors used for linear low-density polyethylene production: the Basell and the Mitsui reactors. The results showed that the gas-solid contact quality was better in the Mitsui reactor compared to the Basell reactor. For instance, at normalized bed heights of 0.96, CoV was 4% for Basell and 1.3% for Mitsui. In addition, across all bed heights, the Mitsui reactor demonstrated a lower CoV, suggesting better gas-solid contact quality. In terms of solid particle mixing, the Basell reactor showed higher axial solid particle velocities and more intense solid mixing compared to the Mitsui reactor. In conclusion, the hydrodynamic comparison showed that the quality and uniformity of the two-phase contact in the reactor used in Mitsui technology was higher than in the Basell reactor. On the other hand, it was observed that the solid particles in the Basell reactor were moving at a higher velocity in the axial direction, resulting in better mixing of the solid particles.

References

- P. Galli, G. Vecellio, Polyolefins: The most promising large-volume materials for the 21st century, Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry, 42(3) (2004) 396-415.
- [2] S. Schneiderbauer, S. Puttinger, S. Pirker, P. Aguayo, V. Kanellopoulos, CFD modeling and simulation of industrial scale olefin polymerization fluidized bed reactors, Chemical Engineering Journal, 264 (2015) 99-112.
- [3] M. Khan, M. Hussain, Z. Mansourpour, N. Mostoufi, N. Ghasem, E. Abdullah, CFD simulation of fluidized bed reactors for polyolefin production–A review, Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 20(6) (2014) 3919-3946.
- [4] K. Jang, Y. Feng, H. Li, Investigation of Bubble Behavior in Gas-Solid Fluidized Beds with Different Gas Distributors, Chemical Engineering & Technology, 44(4) (2021) 723-731.
- [5] T.B. Anderson, R. Jackson, Fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of motion, Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 6(4) (1967) 527-539.
- [6] C.K. Lun, S.B. Savage, D. Jeffrey, N. Chepurniy, Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield, Journal of fluid mechanics, 140 (1984) 223-256.
- [7] D. Gidaspow, Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions, Academic press, 1994.
- [8] P.C. Johnson, R. Jackson, Frictional–collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing, Journal of fluid Mechanics, 176 (1987) 67-93.
- [9] J. Sinclair, R. Jackson, Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions, AIChE journal, 35(9) (1989) 1473-1486.
- [10] M. Syamlal, T.J. O'Brien, Computer simulation of bubbles in a fluidized bed, in: AIChE Symp. Ser, Publ by AIChE, 1989, pp. 22-31.
- [11] A. Busciglio, G. Vella, G. Micale, L. Rizzuti, Analysis of the bubbling behaviour of 2D gas solid fluidized beds: Part II. Comparison between experiments and numerical simulations via digital image analysis technique, Chemical Engineering Journal, 148(1) (2009) 145-163.

نشريه مهندسي مكانيك اميركبير

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۶، شماره ۴، سال ۱۴۰۳، صفحات ۵۱۷ تا ۵۴۲ DOI: 10.22060/mej.2024.22927.7693

بررسی هیدرودینامیکی راکتور فاز گاز دو تکنولوژی متفاوت پلی اتیلن در مقیاس صنعتی

پیمان کریم زاده سورشجانی، حمیدرضا نوروزی*

مرکز مهندسی و مدل سازی چند مقیاسی جریان سیال، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

تاریخچه داوری: دریافت: ۱۴۰۲/۱۰/۲۵ بازنگری: ۱۴۰۳/۰۳/۲۵ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۴/۲۰ ارائه آنلاین: ۱۴۰۳/۰۵/۲۹

کلمات کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی پلیمریزاسیون اتیلن مدل سازی اولری راکتور بستر سیال اوپن فوم **خلاصه:** راکتورهای بستر سیال گاز–جامد یکی از روشهای متداول برای تولید پلی اتیلن سبک خطی است. کیفیت تماس دو فاز و اختلاط ذرات جامد در این گونه راکتورها تاثیر قابل ملاحضهای بر روی واکنش پلیمریزاسیون دارد. در این پژوهش رفتار هیدرودینامیکی دو راکتور تحت لیسانس شرکتهای بازل و میتسویی، با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور از مدل دو فازی با تئوری جنبشی جریان گرانولی استفاده شد. مدل ابتدا با استفاده از دادههای آزمایشگاهی به صورت جامع اعتبار بخشی شد و سپس تحلیل دو راکتور صنعتی میتسویی و بازل صورت گرفت. نتایج نشان داد یکنواختی کسر حجمی فاز گاز که نشانگر کیفیت تماس دو فاز گاز و جامد است، در هر دو راکتور با فاصله گرفتن از کف بستر روند افزایشی داشته بهطوری که در ارتفاع نرمال ۹۶/۰ همگنی فازها به بیشترین مقدار می رسد. در این ارتفاع ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسویی به ترتیب برابر ۲۰۰ و درا همچنین همگنی فازها در ارتفاعات مختلف در راکتور میتسویی همواره بیشتر از راکتور بازل است که این نشان از کیفیت تماس بالاتر دو فاز در این راکتور می باشد. علاوه بر این، میانگین زمانی سرعت محوری ذرات جامد نیز در ارتفاعات مختلف نشان داد که شدت مرکت ذرات جامد در راکتور بازل بالاتر است به طوری که در ارتفاع نرمال ۲۰۷۲ سرعت محوری ذرات جامد در راکتور بازل تقریبا ترکت ذرات جامد در راکتور می باشد. علاوه بر این، میانگین زمانی سرعت محوری ذرات جامد نیز در ارتفاعات مختلف نشان داد که شدت مرکت ذرات جامد در راکتور بازل بالاتر است به طوری که در ارتفاع نرمال ۲/۷۲ سرعت محوری درات جامد در راکتور بازل تقریبا ۲ متر بر ثانیه و در راکتور میتسویی تقریبا ۲ متر بر ثانیه می باشد. با توجه به پارامتر سرعت محوری می توان گفت که کیفیت اختلاط

۱ – مقدمه

امروزه پلی الفینها شامل پلی اتیلن، پلی پروپیلن، الاستومر اتیلن-پروپیلن به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد فیزیکی، شیمیایی و مکانیکی، فرآیند پذیری بالا، هزینه پایین، غیرسمی بودن و غیره به طور گسترده در صنایع مختلف مورد استفاده قرار میگیرند [۱, ۲]. در میان پلی الفینها، پلی اتیلن بهعنوان پر مصرفترین پلی الفین شناخته میشود [۱] و با توجه به اهمیت بسیار بالای آن، تاکنون روشهای مختلفی برای تولید آن توسعه داده شده است که به دو دستهی فرآیندهای فشار بالا و فرآیندهای فشار پایین تقسیم میشوند. فرآیندهای فشار بالا در راکتورهای اتوکلاو و لولهای انجام میپذیرند. به منظور رسیدن به نرخ واکنش مورد نظر فشاری بین ۱۵۰–۳۵ میپذیرند. این نوع فرآیندها نیازمند تجهیزات مقاوم در برابر فشار بالا میباشند. فرسودگی پمپها و کمپرسورها و هزینهی سرمایه گذاری بالا از جمله مشکلات این روش میباشد[۳]. در مقابل فرآیندهای فشار پایین به

* نویسنده عهدهدار مکاتبات: h.norouzi@aut.ac.ir

دلیل فشار پایین و پیچیدگی کمتر طراحی و تجهیزات، بیشتر در صنعت مورد توجه قرار گرفتهاند. فرآیندهای فشار پایین به چند دسته تقسیم میشوند که عبارتند از: فرآیند سوسپانسیون، فرآیند محلول و فرآیند فاز گاز. در این میان، فرآیند فاز گاز با توجه به مزایای فراوان همچون هزینه سرمایه گذاری پایین، عدم احتیاج به حلال مایع به طور گسترده در صنعت مورد استفاده قرار می گیرد [۴].

قلب فرآیندهای فاز گازی فشار پایین برای تولید پلی اتیلن، راکتور بستر سیال است. در راکتورهای بستر سیال مورد استفاده در پلیمریزاسیون اتیلن، واکنش پلیمریزاسیون با تماس بین مونومر گازی و ذرات جامد انجام میشود. تاکنون پیکربندیهای مختلفی توسط شرکتهای ارائه دهنده تکنولوژی پیشنهاد شده است. تقریبا در تمام تکنولوژیهای مطرح شده، فرآیند پلیمریزاسیون شامل شرایط عملیاتی، نوع کاتالیست، مونومر، کومونومر و غیره یکسان است اما در جزئیات تفاوتهایی بین آنها وجود دارد.

Creative Commons License) حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) (Creative Commons License) او من این ایسانس، از آدرس https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode دیدن فرمائید.

یکی از تکنولوژیهای مطرح، فرآیند اسفریلین میباشد که تحت لیسانس شرکت بازل است و بهطور گسترده در صنعت پتروشیمی از آن استفاده میشود. این فرآیند از انعطاف پذیری بالایی برای تولید گریدهای مختلف پلی اتیلن برخوردار است و از آن برای تولید پلی اتیلن سبک خطی، پلی اتیلن سنگین و پلی اتیلن با دانسیته متوسط استفاده میشود [۵]. یکی دیگر از تکنولوژیهای مورد استفاده برای تولید پلی اتیلن سبک خطی، تکنولوژی میتسویی میباشد. با توجه به اینکه از مشکلات موجود در راکتورهای بستر سیال، چسبندگی ذرات پلیمر تولید شده به دیوارههای راکتور و همچنین ایجاد کلوخهها میباشد، از یک همزن با سرعت پایین استفاده میشود. در این راکتور، همزن علاوه بر جلوگیری از چسبندگی ذرات پلیمر به دیواره، باعث شکستن کلوخههای تشکیل شده میشود.

بنابراین با وجود یکسان بودن شرایط واکنش در هر دو تکنولوژی بازل و میتسویی، مشاهده میشود در جزئیات پیکربندی راکتور با یکدیگر تفاوت داشته که باعث تغییراتی در هیدرودینامیک راکتورها شامل چگونگی اختلاط ذرات جامد و تماس بین دو فاز میشود. این تغییرات هیدرودینامیکی خود باعث تغییر در عملکرد راکتور و شرایط واکنش میشوند.

در راکتورهای بستر سیال مورد استفاده در فرآیندهای فاز گاز پلیمریزاسیون اتیلن، با توجه به اینکه واکنش پلیمریزاسیون با تماس بین دو فاز انجام می شود [۴]، بررسی چگونگی و کیفیت تماس آنها از اهمیت بالایی برخوردار است. برای مثال اگر توزیع ذرات کاتالیست به صورت یکنواخت در راکتور صورت نگیرد، مونومر گازی با انتخاب مسیر کم اصطکاک از مناطقی گذر می کند که ذرات جامد کمتری وجود دارد و این باعث می شود که گاز بدون واکنش از راکتور خارج شود. این خود باعث کاهش بازده، تولید محصول غیر یکنواخت و همچنین کنترل دمایی دشوار راکتور می شود. همچنین اگر اختلاط ذرات جامد در این راکتور به خوبی انجام نشود امکان تشکیل نقاط داغ در راکتور و احتمال خاموشی واحد وجود خواهد داشت.

برای بررسی هیدوردینامیک راکتورهای بستر سیال گاز-جامد دو روش اولر-لاگرانژ و اولر-اولر وجود دارد. در روش اولر-لاگرانژ فاز گاز پیوسته و فاز ذره گسسته در نظر گرفته میشود. در روش اولر-اولر، دو فاز گاز و جامد بهعنوان سیال پیوسته در هم تنیده شده درنظر گرفته میشوند و معادلات پیوستگی و اندازه حرکت برای هر دو فاز درنظر گرفته میشوند. با توجه به حجم بسیار زیاد محاسبات مربوط به روش اولر-لاگرانژ، از این روش برای

شبیهسازی راکتورهای صنعتی استفاده نمی شود [۶].

تاکنون مطالعات فراوانی بر روی بررسی هیدرودینامیکی راکتورهای بستر سیال انجام گرفته است. یکی از تحقیقات جدید انجام گرفته در این زمینه، پژوهش انجام شده توسط جنگ و همکاران^۴ [۷] میباشد. آنها با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی به بررسی رفتار حبابها در یک راکتور بستر سیال گاز – جامد در مقیاس آزمایشگاهی و با چهار نوع توزیع کننده ی مختلف گاز پرداختند. آنها نتیجه گرفتند که بهم پیوستن حبابها در نزدیکی توزیع کننده گاز با کاهش گام سوراخها^ه و افزایش اندازه سوراخها طی یک سطح باز ثابت، افزایش مییابد [۷].

یکی دیگر از تحقیقات انجام گرفته، بررسی هیدرودینامیکی راکتورهای پلیمریزاسیون بستر سیال توسط چن و همکاران² [۸] میباشد. آنها از شبیه سازی دو بعدی و همچنین مدل اولری – اولری استفاده کردند. آنها اثر شکل توزیع کننده گاز را بر روی رفتار جریان راکتور پلیمریزاسیون در مقیاس آزمایشگاهی و بدون درنظر گرفتن واکنش مورد بررسی قرار دادند و نتیجه گرفتند فرآیند سیالیت در هر دو نوع توزیع کننده گاز تقریبا مشابه است [۸].

زو و همکاران [P] طی پژوهشی به بررسی اثر نسبت ارتفاع به قطر بستر (H/D) بر روی اختلاط گاز – جامد در یک راکتور بستر سیال دو بعدی که حاوی ذرات گلدارت B میباشند پرداختند. آنها نیز از مدل اولری – اولری استفاده کردند. آنها نتیجه گرفتند در نسبت ارتفاع به قطر برابر ۱/۵، توزیع سرعت ذرات در امتداد شعاع راکتور در ارتفاعات مختلف از راکتور از نوسانات کمتری برخوردار است و درنتیجه کیفیت سیالیت بالاتر است [۹].

در پژوهشی دیگر، سان و همکاران^۸ [۱۰] نشان دادند که شبیه سازی دینامیک سیالات محاسباتی بر پایه تئوری جنبشی جریان گرانولی توانایی توضیح ویژگیهای دینامیکی راکتور بستر سیال گاز – جامد را دارند. آنها از ذرات پلی اتیلن سبک خطی و همچنین شبیه سازی دو بعدی استفاده کرده و با استفاده از نوسانات فشاری مدل توسعه دادهی خود را راستی آزمایی کردند. آنها همچنین برای دستیابی به مناسب ترین معادلهی ضریب درگ، از مقایسهی الگوی فشار در جهت محوری راکتور با نتایج آزمایشگاهی استفاده کردند و نتیجه گرفتند ضریب درگ سیاملال و اوبراین^۴ توانایی پیش بینی رفتار هیدرودینامیکی بستر را دارد [۱۰].

¹ Spherilene

² LyondellBasell

³ Mitsui

⁴ Jang et al.

⁵ Pitch

⁶ Chen et al. 7 Zu et al.

⁷ Zu et al.8 Sun et al.

 $[\]delta$ Sum et al.

⁹ Syamlal O'Brien

$$\varepsilon_s + \varepsilon_g = v \tag{(7)}$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_{g}\rho_{g}u_{g})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_{g}\rho_{g}u_{g}u_{g}) =$$

$$=$$

$$\nabla \cdot \overline{\tau_{g}} - \varepsilon_{g}\nabla P + \beta(u_{g} - u_{s}) + \varepsilon_{g}\rho_{g}g$$
(*)

$$\frac{\partial(\varepsilon_{s}\rho_{s}\mathbf{u}_{s})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_{s}\rho_{s}\mathbf{u}_{s}\mathbf{u}_{s}) =$$

$$\nabla = \frac{1}{\nabla \cdot \tau_{s}} - \varepsilon_{s}\nabla P - \nabla P_{s} - \beta(\mathbf{u}_{g} - \mathbf{u}_{s}) + \varepsilon_{s}\rho_{s}g$$
(a)

در روابط (۴) و (۵)، عبارات سمت چپ بیانگر تغییرات خالص مومنتوم هر فاز و سمت راست بیانگر نیروهایی است که به سیال وارد می شوند. همچنین در این روابط β ضریب نیروی درگ، u_s سرعت فاز گاز، u_s سرعت فاز جامد، a^3 کسر حجمی فاز گاز، a^3 کسر حجمی فاز جامد، π تنسور تنش فاز گاز و $\overline{\tau_s}$ تنسور تنش فاز جامد می باشد. در جریان های دو فازی گاز – امد، دو فاز در قالب نیروی درگ با یکدیگر بر همکنش دارند که این نیرو از پارامترهای بسیار مهم و تاثیر گذار در مدلسازی این نوع سیستمها می باشد. در این پژوهش از مدل سیاملال و اوبراین [۱۳] استفاده شده است که برای سیستمهای گاز–جامد توصیه می شود.

برای شبیه سازی همزن مورد استفاده در راکتور میتسویی نیز از روش قاب مرجع متحرک^۱ استفاده شده است. در این روش، ناحیه محاسباتی به یک ناحیه دوار (محدوده همزن) و یک ناحیه ثابت (ناحیه خارج از همزن) تقسیم میشود. در ناحیه ثابت معادلات بقا به صورت معمول حل میشوند و در قاب چرخان معادلات بقاء مومنتوم با در نظر گرفتن نیروهای اضافی که حاصل از چرخش است حل میشوند.

در کنار معادلات اصلی بقای جرم و مومنتوم، معادلات دیگری نیز وجود دارند که برهمکنش بین ذرات جامد – گاز، جامد – جامد و جامد – دیواره را مشخص میکنند [۱۴]. در شبیه سازی اولری که در آن فاز جامد به صورت پیوسته درنظر گرفته میشود، به یک مدل مناسب برای پیش بینی رفتار رئولوژیک^۲ فاز جامد نیاز است تا بتوان به وسیلهی آن رفتار رئولوژیک ذرات جامد که به مانند سیال در نظر گرفته شدهاند را پیش بینی کرد. در این در پژوهشی دیگر [۱۱]، رفتار هیدرودینامیکی یک راکتور بستر سیال دو بعدی توسط دینامیک سیالات محاسباتی و نرم افزار فلوئنت مورد بررسی قرار گرفت. این پژوهشگران نیز از مدل اولری – اولری همراه با تئوری جنبشی جریان گرانولی و ضریب درگ سیاملال– اوبراین برای شبیه سازی راکتور بستر سیال گاز – جامد استفاده کردند و اثر سرعت گاز ورودی، افت فشار و انبساط سطح بستر را مورد مطالعه قرار دادند. آنها مشاهده کردند که پس از شروع به نوسان ذرات جامد افت فشار بستر تقریبا ثابت می شود [۱۱].

با بررسی مطالعات صورت گرفته در زمینه شبیه سازی هیدرودینامیکی راکتورهای بستر سیال مورد استفاده در فرآیند پلیمریزاسیون، کمتر پژوهشی را میتوان یافت که راکتور را با توجه به شرایط عملیاتی واحد و در مقیاس صنعتی مورد مطالعه قرار داده باشند. اکثر مطالعات انجام گرفته در مقیاس آزمایشگاهی بوده و متوجه تکنولوژی خاصی نمیباشند. همچنین مطالعهای را نمیتوان یافت که پیکربندی متفاوت راکتورها و اثرات آن را بر روی هیدرودینامیک داخل راکتور مقایسه کرده باشد. در این مقاله به بررسی هیدرودینامیکی دو راکتور صنعتی با پیکربندی مختلف پرداخته میشود. مقایسه ی هیدرودینامیکی دو راکتور صنعتی با سیکربندی مختلف پرداخته میشود. مقایسه میشود سنع می استفاده شده است. برای مقایسه میشود و در نهایت با استفاده از مدل هیدرودینامیکی مدل اعتباربخشی میشود و در نهایت با استفاده از مدل هیدرودینامیکی توسعه داده شده مقایسه ی هیدرودینامیکی دو راکتور صورت میپذیرد.

۲- مدلسازی و شبیه سازی ۲- ۱- معادلات حاکم

برای حل یک سیستم دو فازی با استفاده از روش اولری، هر دو فاز گاز و جامد به صورت پیوسته درنظر گرفته میشوند. فازها با یکدیگر برهمکنش دارند و هر کدام فضایی را در یک سلول محاسباتی اشغال میکنند که آن را با جز حجمی نشان میدهند. معادلات حاکم، معادلات متوسط گیری شدهی بقاء جرم و اندازه حرکت خطی است که منجر به روابط زیر میشوند [۱۲]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla (\varepsilon_g \rho_g u_g) = \cdot \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla .(\varepsilon_s \rho_s \mathbf{u}_s) = \boldsymbol{\cdot}$$
 (7)

¹ Moving Reference Frame

² Rheological behavior

جدول ۱. معادلات تجربی استفاده شده در مدل هیدرودینامیکی

گيداسپو [۱۵]	مدل ويسكوزيته
گيداسپو [۱۵]	مدل كانداكتيويتي
لون [۱۴]	مدل فشار گرانولی
جوهانسون جکسون شافر [۱۶]	مدل تنش اصطکاکی
سینسر جکسون [۱۷]	تابع توزيع شعاعى
سياملال اوبراين [١٣]	مدل درگ
سون جکسون شافر	ضرايب مدل جوهان
• / • Δ	فرود
٢	پارامتر <i>n</i>
۵	پارامتر P
٣٠	ϕ پارامتر
• / • ۵	$\mathbf{e}_s > \mathbf{e}_{s,\min}$ پارامتر

Table 1. Empirical equations used in the hydrodynamic model

پژوهش از تئوری جنبشی جریان گرانولار ٔ برای بیان برهمکنشهای مذکور استفاده شده است. معادله بقاء دمای گرانولی برای فاز جامد به صورت زیر نوشته می شود:

$$\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \left[\frac{\partial(\boldsymbol{\varepsilon}_{s} \boldsymbol{\rho}_{s} \boldsymbol{\theta})}{\partial t} + \nabla(\boldsymbol{\varepsilon}_{s} \boldsymbol{\rho}_{s} \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{u}_{s}}) \right] = (\mathcal{P})$$

$$= (-\nabla P_{s} \mathbf{I}_{s}^{\mathsf{T}} + \tau_{s}) : \nabla \boldsymbol{u}_{s} + \nabla(\boldsymbol{\kappa}_{s} \nabla \boldsymbol{\theta}) - \gamma_{s} + \boldsymbol{\varphi}_{\theta}$$
(8)

در این معادله، سمت چپ تغییرات خالص انرژی جنبشی، اولین عبارت سمت راست معادله بیانگر مقدار انرژی تولید شده توسط تنسور تنش جامد میباشد که این انرژی ناشی از تجمع موضعی ذرات است که باعث تولید فشار جامد و تنسور تنشی میشود. عبارت دوم بیانگر مقدار نفوذ انرژی است که بر اساس گرادیان دمای گرانولی تعریف میشود و برابر حاصلضرب ضریب نفوذ دمای گرانولی در گرادیان دمای گرانولی میباشد، عبارت سوم برای هدر رفت انرژی به دلیل برخوردهای غیر الاستیک بین ذرات و عبارت آخر تبادل انرژی بین فازهای گاز و جامد را نشان میدهند که میزان از بین رفتن انرژی گرانولی به دلیل اصطکاک بین ذرات و گاز را محاسبه میکند

1 KTGF: Kinetic theory of granular flow

[۱۵]. زیر مدل های مورد استفاده برای تخمین عبارتهای موجود معادلههای (۴) تا (۶) در جدول ۱ آورده شده است.

هنگامی که کسر حجمی جامد بالا است، تماس طولانی بین ذرات جامد برقرار میشود و همین موضوع سبب افزایش تنش بین ذرات جامد بهواسطه افزایش اصطکاک میشود. تنش اصطکاکی که از برخورد مداوم ذرات نتیجه میشود، شامل دو پارامتر مهم ویسکوزیته برشی اصطکاکی^۲ و فشار اصطکاکی^۲ جامد است که به ترتیب در محاسبه نیروهای مماسی و عمودی اصطکاکی به کار میرود[۱۶, ۱۸]:

$$\bar{\tau}_{s,f} = P_{s,f} + \mu_{s,f} (\nabla u_s + (\nabla u_s)^T)$$
(Y)

تنش اصطکاکی به تنش محاسبه شده از تئوری جنبشی برای $\mathcal{E}_s > \mathcal{E}_{s,\min}$ اضافه می شود[۱۶]:

$$P_s = P_{kinetic} + P_{s,f} \tag{(A)}$$

² Frictional Shear Viscosity

³ Frictional Solid Pressure

9

۲- ۳- ۲- شبیه سازی های اعتبار بخشی

با استفاده از دادههای موجود در مقالهی باسیگلیو و همکاران [۲۱] مدل هیدرودینامیکی توسعه داده شده اعتبار بخشی شده است. با توجه به اینکه ذرات جامد مورد بررسی در راکتور صنعتی گلدارت Bو همچنین رژیم جریانی حبابی میباشد، نیاز است که دادههای آزمایشگاهی مستخرج نیز در شرایط مشابهای قرار داشته باشند و با علم بر این موضوع یژوهش انجام گرفته توسط باسیگلیو و همکاران [۲۱] انتخاب شده است. در این راستی آزمایی، هندسهی سیستم مورد بررسی همانند هندسهی پژوهش انجام گرفته توسط باسیگلیو و همکاران [۲۱] انتخاب شد. اطلاعات موردنیاز مستخرج از پژوهش مذکور به منظور توسعه مدل هیدرودینامیکی حاکم بر سیستم در جدول ۲ آورده شدهاند. لازم به ذکر است که اندازه سلول ها با توجه به نتایجی که از مرحله استقلال از شبکه بدست آمد، انتخاب شد.

اندازه گیری قطر حباب:

یکی از پارامترهای مورد استفاده برای اعتبار سنجی مدل هیدرودینامیکی، قطر حبابهای تشکیل شده در بستر میباشد. بنابراین باید قطر حبابهای ایجاد شده در شبیه سازیهای صورت گرفته اندازه گیری شده و با مقادیر موجود در مقالهی باسیگلیو و همکاران [۲۱] که از آزمایش بدست آمدهاند مورد قیاس قرار گیرند. برای اندازه گیری قطر حباب ابتدا فرض شد که فضایی از بستر که کسر حجمی گاز بیشتر از ۰/۸ است حباب در نظر گرفته شود. ابتدا نواحیای (مجموعه سلولهای به هم پیوستهای) که کسر حجمی بیشتر از ۸/۰ داشت در بستر علامت گذاری شد و در ادامه حجم هر کدام از این نواحی مجزا که حبابها هستند محاسبه شد. از حجم هر کدام از این نواحی قطر معادل کره محاسبه و بعنوان اندازه حباب گزارش شد.

$$\boldsymbol{\mu}_{s} = \boldsymbol{\mu}_{kinetic} + \boldsymbol{\mu}_{s,f} \tag{9}$$

 $\mu_{s,f}$ مدلهای متفاوتی برای محاسبه ویسکوزیته تنش برشی جامد و فشار اصطکاکی جامد $P_{s,f}$ وجود دارد. در این پژوهش مدل شافر [۱۹] برای ویسکوزیته تنش اصطکاکی و جانسون و همکاران [۱۶] برای محاسبهی فشار جامد استفاده شده است. این مدل ها نتایج بهتری نسبت به سایر مدل ها برای ذرات گلدارت B (مشابه ذرات این پژوهش) ایجاد کردهاند .[8]

۲-۲- شرایط مرزی و اولیه

در تمام شبیه سازیهای انجام گرفته شبیه سازی از حالت بستر ثابت شروع شده است. بنابراین برای مقدار اولیه سرعت فازهای جامد و گاز صفر، و کسر حجمی جامد به گونهای تنظیم شد که قسمتی از بستر از ذرات پر شده باشد (با كسر حجمي برابر با ۲۴/۰). فشار اوليه برابر با فشار عملياتي راكتور/ بستر در نظر گرفته شد. برای تمام شبیه سازیها برای سرعت فاز گاز، در ورودی شرط سرعت ثابت برای گاز (مقدار سرعت بر اساس شرایط شبیه سازی مشخص شد)، شرط عدم لغزش روی دیوار و شرط توسعه یافتگی در خروجی در نظر گرفته شد. فشار بستر/ راکتور نیز در خروجی تنظیم شد. برای فاز جامد نیز، در دیوارهها شرط لغزش نسبی، در ورودی سرعت صفر، و در خروجی هم توسعه یافته گی در نظر گرفته شد. برای کسر حجمی نیز، گرادیان صفر بر روی دیوار، ورودی و خروجی در نظر گرفته شد.

۲- ۳- مراحل شبیه سازیها

به منظور شبیه سازی راکتورهای صنعتی دو تکنولوژی بازل و میتسویی با ابزار دینامیک سیالات محاسباتی، ابتدا باید عملیات استقلال از شبکه صورت گیرد. با توجه به اینکه عملیات استقلال از شبکه در راکتورهای صنعتی به علت حجیم بودن راکتورها هزینه یمحاسباتی بسیار سنگینی دارد، عملیات استقلال از شبکه در راکتوری کوچکتر انجام گرفت. در ادامه مدل هیدرودینامیکی اعتبار بخشی شد. سپس با توجه به اندازه مناسب سلولها (استقلال از شبکه) و مدل اعتبار بخشی شده، رفتار هیدرودینامیکی راکتورهای صنعتی پیش بینی شد.

۲- ۳- ۱ - شبیه سازیهای استقلال از شبکه

برای انجام عملیات استقلال از شبکه، با توجه به حجیم بودن راکتورهای

جدول ۲. هندسه و مشخصات سیستم بستر سیال مورد استفاده برای اعتبار سنجی مدل هیدرودینامیکی [۲۱]

Table 2.	Geometry	and	specificati	on of	the	fluidized	bed	reactor	used	for	hydroc	lynami	c model
validation [21]													

مقدار	متغير	مقدار	متغير
۲۵۰	قطر ذرات (micron)	٨٠٠	ارتفاع بستر (mm)
20	دانسیته ذرات (kg/m ³)	۱۸۰	عرض بستر (mm)
۵/۲۴	حداقل سرعت سياليت (cm/s)	۱۵	عمق بستر (mm)
هوا	گاز (-)	36.	ارتفاع اوليه بستر (mm)
		۰/۳۵	کسر اوليه فاز گاز (-)



شکل ۱. هندسه ی راکتور های مورد استفاده برای مقایسه هیدرودینامیکی راکتور مورد استفاده در (الف) تکنولوژی بازل (ب) تکنولوژی میتسویی



مشخصات هر دو فاز شامل سرعت مونومر گاز ورودی، دانسیته و قطر ذرات پلیمر، ویسکوزیتهی گاز ورودی و کسر حجمی ابتدایی ذرات جامد مطابق با دادههای صنعتی در شبیه سازی اعمال گردید. هندسهی تولید شده برای دو راکتور مطابق شکل ۱ میباشد. همچنین اطلاعات مربوط به هر فاز و همچنین شرایط عملیاتی و شبیه سازی ها در جدول ۳ آورده شدهاند.

۲- ۳- ۳- مقایسه هیدرودینامیکی راکتورها در مقیاس صنعتی برای شبیه سازیهای راکتورهای صنعتی، در گام نخست، برای ترسیم هندسهی راکتورهای صنعتی از نرم افزار سالیدورک ۲۰۱۵ و نقشههای صنعتی^۱ استفاده شد. لازم به ذکر است که با توجه به حجم بسیار بالای راکتورهای صنعتی، ابعاد راکتور با مقیاس ۱:۴ کوچک نمایی شد اما

¹ General Arrangement Drawing

جدول ۳. مشخصات راکتورهای صنعتی شبیه سازی شده

Table 3. Specification of simulated industrial reactors

متغير	بازل	میتسویی	متغير	بازل	ميتسويى
قطر بستر (mm)	1.70	1170	وزن مولکولی گاز (gr/mol)	۴۰/۶۸	۴۰/۶۸
ارتفاع کلی بستر (mm)	V400	488.	مدت شبیه سازی (S)	٣٠	٣٠
كسر اوليه فاز گاز (-)	۰/۵۶	• /۵۶	میانگین گیری (S)	۳۰-۱۰	۳۰-۱۰
قطر ذرات (micron)	1880	1880	سرعت همزن (rpm)	NA	٢
دانسیته ذرات (kg/m ³)	٩١٨	٩١٨	فشار عملیاتی (Barg)	74	74
سرعت گاز ورودی (m/s)	• / ۶ ١	• /8 \	دمای عملیاتی (°C)	٨٠	٨٠
ویسکوزیته گاز (Pa.s)	•/••••)١٨۵	۰/۰۰۰۱۱۸۵	ضريب برخورد (-)	•/٩	•/٩





Fig. 2. TA section of the generated mesh for two simulated industrial reactors: (a) Basell technology (b) Mitsui technology

نیست، بنابراین در این ناحیه از سلولهای درشت تری استفاده شد. در تولید این شبکه، از شبکه پس زمینه کاملا متعامد استفاده شده است. بنابراین در شبکه تولید شده نهایی، بیش از ۹۰ درصد سلولها متعامد هستند و این در کاهش خطاهای برش عددی که بواسطه گسسته سازی معادلات ایجاد می شود تاثیر بسیار زیادی دارد. شبکه حاصل برای راکتور تکنولوژی بازل شامل تقریبا ششصد و سی هزار سلول و برای راکتور تکنولوژی میتسویی برای شبکه بندی راکتور از ابزار موجود در نرم افزار اوپن فوم^۱ استفاده شد. اندازه سلولها بر اساس نتایج حاصل از استقلال از شبکه انتخاب شد. شبکه تولید شده برای دو راکتور صنعتی مطابق شکل ۲ میباشد. در منطقه باز شده بالای راکتور که فقط فاز گاز وجود دارد، سلولهای ریز مورد نیاز

1 OpenFOAM

شامل تقريبا هشتصد و شصت هزار سلول بود.

۲- ۴- نرم افزار و سخت افزار مورد استفاده

برای شبیه سازی هیدرودینامیکی از نرم افزار متن باز اوپن فوم نسخهی ۳ استفاده شده است. همچنین از حلگر multiphaseEulerFoam ۱ستفاده شده است. کامپیوتر مورد استفاده مجهز به پردازنده مرکزی ۲۹۶۰ ۲۹۶۰ میکه ۲۹۶۰ میکه به ۲۹۶ میکه ۲۹۶ گیگابایتی بود. این شبیه سازیها در سیستم عامل ۲۰٫۴ Ubuntu انجام گرفتند.

با توجه به حجم بالای راکتورهای صنعتی و همچنین تعداد بالای سلولهای موجود در هر راکتور، شبیه سازی یک ثانیه از راکتورهای میتسویی و بازل با استفاده از سخت افزار ذکر شده به ترتیب نزدیک به ۵/۵ و ۴ ساعت زمان به خود اختصاص داد. در نتیجه برای ۳۰ ثانیه شبیه سازی راکتور میتسویی و بازل با استفاده از سخت افزار مورد استفاده به ترتیب نزدیک به ۷ و ۵ روز زمان احتیاج بود.

۳- نتایج و بحث

در این بخش ابتدا عملیات استقلال از شبکه انجام می گیرد تا مناسب ترین شبکه برای انجام شبیه سازی های دینامیک سیالات محاسباتی انتخاب شود. پس از انتخاب مناسب ترین شبکه برای راکتور مورد نظر، به بررسی مدل هیدرودینامیکی توسعه داده شده و راستی آزمایی داده های شبیه سازی با داده های آزمایشگاهی پرداخته می شود. پس از توسعه مدل هیدرودینامیکی و اطمینان از اعتبار مدل توسعه داده شده، دو تکنولوژی بازل و میتسویی از نظر هیدرودینامیکی مقایسه خواهند شد.

۳- ۱- بررسی استقلال نتایج از شبکه

در بررسی هیدرودینامیکی راکتورهای بستر سیال توزیع کسر حجمی فاز گاز/فاز جامد نشان دهندهی کیفیت تماس دو فاز است. مقدار میانگین زمانی کسر حجمی فاز جامد در جهت محوری راکتور و در دو فاصلهی مختلف از مرکز راکتور (مرکز راکتور و در وسط خط واصل مرکز و دیوار راکتور) مورد بررسی قرار گرفت. میانگین گیری زمانی از زمان ۱۰ تا ۳۰ ثانیه انجام گرفت. در شکلهای ۳ (الف) و (ب) محور افقی بیانگر فاصله از کف راکتور (جهت محوری) و محور عمودی بیانگر میانگین زمانی کسر حجمی جامد میباشد. لازم به ذکر است که تعداد سلول ۲۰۰٬۹۰۰، ۱۱۲٬۰۰۰، ۳۴٬۰۰۰ و ۱۴٬۰۰۰ به ترتیب حدودا معادل اندازه سلول ۵٬ ۱۰، ۱۵ و ۲۰ برابر قطر ذرات جامد میباشد.

مطابق با شکل ۳ با تغییر اندازه سلولهای شبکه از ۲۰ برابر قطر ذرات جامد به ۱۵ برابر و پس از آن به ۱۰ برابر قطر ذرات جامد تغییرات زیادی در میانگین کسر حجمی جامد ایجاد میشود. بهطوریکه انبساط سطح بستر در هر مرحله کاهش زیادی خواهد داشت و در ارتفاع کمتری مقدار کسر حجمی جامد صفر شده است. سپس با تغییر اندازه سلولهای شبکه از ۱۰ برابر قطر ذرات جامد به ۵ برابر قطر ذرات جامد، مشاهده میشود تغییرات در محور عمودی ناچیز بوده و انبساط سطح بستر نیز تقریبا بدون تغییر است. اما در این تغییر اندازهی سلول شبکه، تعداد سلولها از ۱۱۲۰۰۰ به ۹۰۰۰۰۰ افزایش پیدا کرده است که افزایش چشمگیری (حدودا ۸ برابر) میباشد.

پس از بررسی مشاهده شد با کاهش اندازه سلولهای شبکه از 10*d* به 5*d* تغییر قابل توجهی در میانگین زمانی کسر حجمی ذرات جامد به وجود نمی آید و تنها حجم محاسبات به طور چشمگیری افزایش پیدا می کند. این افزایش چشمگیر هزینه ی محاسباتی در شبیه سازیهای اصلی که به مراتب از راکتورهای بزرگتری استفاده می شود بیشتر نمایان می شود. بنابراین براساس بررسیهای انجام شده نتیجه می شود اندازه 10*d* مناسب ترین اندازه برای سیستم موردنظر می باشد.

یکی دیگر از روش های مطالعه کیفیت شبکه استفاده از شاخص همگرایی شبکه است [۲۲]. این شاخص سنجهای برای تعیین دوری مقدار محاسبه شده در شبیه سازی از مقدار عددی تقریبی است. این شاخص نشان میدهد که اگر کوچک شدن شبکه مرحلهای اضافه شود جواب چه مقدار تغییر می کند. مقدار کم این شاخص نشان دهنده آن است که مقدار محاسبه شده توسط دینامیک سیالات محاسباتی در بازه نزدیک به جواب تقریبی است. در این مرحله ارتفاع باز شده متوسط بستر معیار خروجی شبیه سازی قرار گرفت. ارتفاع بازشده بستر از کف بستر تا جاییکه کسر حجمی ذرات به کمتر از ۵ درصد میرسد فرض شد. مقادیر ارتفاع باز شده بستر در جدول ۴ در مرکز و در حدفاصل بین مرکز و دیوار بستر برای اندازه سلولهای مختلف آورده شده است. شاخص همگرایی شبکه به شیوهای که در منبع [۲۳] توضیح داده شده است محاسبه و در همین جدول گزارش شد. همانطور که مشاهده می شود با کوچک کردن شبکه از سطح ۴ به ۳ و همچنین از ۳ به ۲ شاخص همگرایی شبکه بالای ۲۰ درصد است که نشان دهنده آن است که خطای محاسبات با کوچک کردن شبکه از سطح ۴ به سطح ۲ کاهش چشمگیری دارد. اما شاخص همگرایی شبکه از سطح ۲ به سطح ۱ حدود ۴ درصد است که همچنان نشان دهنده کاهش خطای محاسبات است، اما به اندازه بسیار

¹ Grid Convergence Index



شکل ۳. مقدار میانگین زمانی کسر حجمی ذرات جامد (زمان ۱۰ تا ۳۰ ثانیه) در جهت محوری راکتور (الف) در مرکز و (ب) وسط حد واصل مرکز و دیوار راکتور مورد استفاده برای عملیات استقلال از شبکه (ارتفاع: ۲۵۰۰ میلیمتر، قطر: ۵۱۰ میلیمتر، قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۳ ۹۱۸ kg/m بسرعت گاز ورودی: ۱۰/۶۱ m/s، ویسکوزیته گاز ورودی: Pa.s ^{۵۰}۰۰ × ۱/۱۸۵)

Fig. 3. The time averaged volume fraction of solid particles (time 10 to 30 seconds) in the axial direction of the reactor (a) in the center and (b) in the middle of the distance between the center and the wall of the reactor used for mesh independency (Height: 2500 mm, diameter: 510 mm, diameter of solid particles: 1685 microns, density of solid particles: 918 kg/m3, inlet gas velocity: 0.61 m/s, inlet gas viscosity: 1.185 × 10-5 Pa.s)

جدول ۴. شاخص همگرایی شبکه بر اساس ارتفاع باز شده بستر در دو مقطع شعاعی بستره

وسط حد واصل مرکز و دیوار راکتور	مرکز راکتور		ارتفاع بستر (متر) در وسط حد واصل مرکز و ديوار راکتور	ارتفاع بستر (متر) در مرکز راکتور	اندازه مش	سطح مش
۴/۵۵	۳/۸۸	درصد شاخص همگرایی سطح ۱ به ۲	١/١	1/178	۵ برابر قطر ذرات	١
TT/V9	۲ ۱/۰ ۷	درصد شاخص همگرایی سطح ۲ به ۳	1/18	١/١٨۶	۱۰ برابر قطر ذرات	٢
24/20	24/27	شاخص همگرایی سطح ۳ به ۴	۱/۳۱	١/٣۴	۱۵ برابر قطر ذرات	٣
			1/47	١/٤٧	۲۰ برابر قطر ذرات	۴

Table 4. Grid convergence index based on the opened height of the bed in two radial sections of the bed



شکل ۴. مقایسه ی توزیع سرعت بالا رفتن حبابها با قطر متغیر حاصل از شبیه سازی و داده های آزمایشگاهی [۲۱] و رابطه ی داویدسون و هریسون[۲۴]: ارتفاع راکتور: ۸۰۰ میلیمتر، عرض راکتور: ۱۸۰ میلیمتر، ارتفاع اولیه بستر: ۳۶۰ میلیمتر، قطر ذرات جامد: ۲۵۰ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۲۵۰۰ kg/m ، حداقل سرعت سیالیت:۵/۲۴ cm/s، گاز ورودی: هوا

Fig. 4. Comparison of the distribution of rising velocity of bubbles with variable diameter from simulation and experimental data [21] and Davidson and Harrison correlation [22]: Reactor height: 800 mm, reactor width: 180 mm, initial bed height: 360 mm, solid particle diameter: 250 microns, solid particle density: 2500 kg/m3, minimum flow rate: 5.24 cm/s, inlet gas: air

> کمتری از مراحل قبل. بنابراین طبق بحثی که در بالا شد، هرچند کاهش اندازه سلول ها از سطح ۲ به سطح ۱ (از ۱۰ برابر به ۵ برابر قطر ذره) تغییر می کند، اما این تغییر به نسبت خیلی زیاد نیست و می توان با تحمل کمی خطا شبیه سازی های سریع تری انجام داد.

۳- ۲- راستی آزمایی مدل هیدرودینامیکی

یکی از موارد بسیار مهم در رفتار راکتورهای بستر سیال با رژیم حبابی، بررسی رفتار حبابها در قالب سرعت بالا رفتن و توزیع اندازه حبابها است. در اینجا سرعت بالارفتن حبابها با قطرهای متفاوت با دادههای آزمایشگاهی[۲۲] و همچنین یکی از رابطههای تجربی داویدسون و هریسون [۴۲] مقایسه شده است.

$$u_b = \cdot \cdot \forall \lor \sqrt{gd_p} \tag{(1.)}$$

شکل ۴ دادههای حاصل از شبیه سازی با دادههای آزمایشگاهی و رابطه داویدسون و هریسون [۲۴] را با یکدیگر مقایسه کرده است. با افزایش قطر حبابها، سرعت بالا رفتن حبابها در شبیه سازی نیز روند افزایشی دارد مطابق آنچه که رابطه نیمه تجربی [۲۴] و دادههای آزمایشگاهی [۲۱] نشان میدهند. همچنین سرعت بالارفتن حباب منتج از شبیه سازی از نظر مقدار در محدوده دادههای آزمایشگاهی و رابطه داویدسون [۲۴] است. بنابراین میتوان گفت که به طور نسبی مدل هیدرودینامیکی توانایی پیش بینی صحیح سرعت بالا رفتن حبابها را دارد.

اندازه حبابها و توزیع اندازه آنها نقش بسیار مهمی در هیدرودینامیک ذرات گلدارت B دارند. حبابها بخشی از جریان دو فازی گاز–جامد هستند که گاز بدون تماس با ذرات جامد (در اینجا پلیمر) و بدون واکنش در طول بستر حرکت میکند. همچنین سرعت بالا رفتن حبابها که قبلا (در شکل ۴) بررسی شد نیز نقش مهمی در کیفیت اختلاط در فاز جامد ایفا میکنند. این موضوع قبلا توسط نوروزی و همکاران [۲۵] نشان داده شده است. در



شکل ۵. مقایسه ی توزیع اندازه حبابها در ارتفاع (الف) ۹۰ و (ب) ۲۷۰ میلیمتری از کف بستر و سرعت ۳/۴ برابر حداقل سرعت سیالیت بین داده های شبیه سازی و آزمایشگاهی: ارتفاع راکتور: ۸۰۰ میلیمتر، عرض راکتور: ۱۸۰ میلیمتر، ارتفاع اولیه بستر: ۳۶۰ میلیمتر، قطر ذرات جامد: ۲۵۰ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۲۵۰۰ kg/m ، حداقل سرعت سیالیت:۵/۲۴ cm/s ، گاز ورودی: هوا. میانگین خطای نسبی شکل الف: ۷ درصد و شکل ب: ۳۸ درصد

Fig. 5. Comparison of the distribution of rising velocity of bubbles with variable diameter from simulation and experimental data [21] and Davidson and Harrison correlation [22]: Reactor height: 800 mm, reactor width: 180 mm, initial bed height: 360 mm, solid particle diameter: 250 microns, solid particle density: 2500 kg/m3, minimum flow rate: 5.24 cm/s, inlet gas: air

> دنباله حبابها جریانی از جامد ایجاد می شود که در نهایت این جابجایی جامد یکی از مکانیسمهای اصلی اختلاط در بسترهای سیال حبابی است. در اینجا هم توزیع اندازه حبابها و هم تغییرات متوسط اندازه حبابها در طول بستر در دو سرعت ظاهری ۲/۴ و ۵ برابر سرعت حداقل سیالیت با دادههای آزمایشگاهی [11] مقایسه می شوند.

> شکل ۵ توزیع اندازه حبابها را در سرعت ۳/۴ برابر حداقل سیالیت نشان میدهد. مطابق با شکل ۵ (الف) که مربوط به ارتفاع ۹۰ میلیمتری است، دادههای مستخرج از شبیه سازی و همچنین دادههای آزمایشگاهی بسیار نزدیک بوده و در هر دو آنها حبابهای با قطر تقریبا ۳ سانتی متری بیشترین سهم از حبابهای موجود را به خود اختصاص دادهاند. در این شکل مشاهده میشود با توجه به اینکه در ارتفاع نسبتا نزدیکی به توزیع کننده گاز قطر حبابها اندازه گیری شده است و هنوز حبابها به یکدیگر متصل نشده و حبابهای بزرگتری تشکیل ندادهاند، حبابهای کوچکی وجود دارند. بالعکس در ارتفاعات بالاتر به دلیل بهم پیوستن حبابها همزمان با بالارفتن از بستر، انتظار مشاهدهی حبابهای بزرگتر میرود.

شکل ۵ (ب) توزیع اندازهی حبابها در ارتفاع ۲۷۸ برابر ارتفاع اولیه بستر (معادل ارتفاع ۲۷۰ میلیمتری از کف بستر) را نشان میدهد. مشاهده میشود توزیع اندازه حبابها هم در نتایج حاصل از شبیه سازی و هم دادههای واقعی دوقلهای میباشد و نتایج حاصل از شبیه سازی در محدودهی قابل قبولی از نتایج آزمایشگاهی قرار دارند. با بالارفتن از کف بستر، قطر حبابها ابتدا روند افزایشی دارند بهطوری که حبابهای با قطر ۲ و ۲/۷ سانتی متری بیشترین تعداد حبابها را به خود اختصاص میدهند. همچنین حبابهایی با قطر ۱۲ سانتی متری نیز دیده میشوند. پدیدهی دیگری که میتوان از این شکل برداشت کرد پدیدهی بهم پیوستن حبابهای کوچک و تشکیل حبابهای بزرگتر و هم چنین شکستن حبابهای بزرگ تشکیل شده میباشد. دو قلهای بودن توزیع بیانگر پدیدهی مذکور میباشد که بخشی از حبابهای کوچک به هم پیوسته حبابهای بزرگتر را تشکیل دادهاند.

انتظار میرود با افزایش سرعت گاز، قطر حبابها نیز افزایش یابد. شکل ۶ توزیع اندازه حبابها را در ۵ برابر سرعت حداقل سیالیت نشان میدهد. مطابق شکل ۶ (الف) در ارتفاع ۲/۲۵ برابر ارتفاع اولیه بستر نیز به مانند شکل



شکل ۶. مقایسه ی توزیع اندازه حبابها در ارتفاع)الف) ۹۰ و)ب) ۲۷۰ میلیمتری از کف بستر و سرعت ۵ برابر حداقل سرعت سیالیت بین داده های شبیه سازی و آزمایشگاهی: ارتفاع راکتور: ۸۰۰ میلیمتر، عرض راکتور: ۱۸۰ میلیمتر، ارتفاع اولیه بستر: ۳۶۰ میلیمتر، قطر ذرات جامد: ۲۵۰ میکرون، دانسیته ذرات جامد:۲۵۰۰ kg/m ، داقل سرعت سیالیت:۵/۲۴ cm/s ، گاز ورودی: هوا. میانگین خطای نسبی شکل الف: ۲۱ درصد و شکل ب: ۴۵ درصد

Fig. 6. Comparison of the size distribution of bubbles at a height of (a) 90 and (b) 270 mm from the bottom of the bed and a velocity of 5 times the minimum fluidization velocity between simulation and experimental data: reactor height: 800 mm, reactor width: 180 mm, initial bed height: 360 mm, diameter of solid particles: 250 microns, density of solid particles: 2500 kg/m3, minimum fluidization velocity: 5.24 cm/s, inlet gas: air. Average relative error of Fig. A: 21% and Fig. B: 45%

شده است، نیروی درگ بر روی ذرات داخل آن سلول به صورت متوسط بیان میشود که با آنچه که در واقعیت وجود دارد متفاوت است. در واقعیت نیروی وارد بر ذرات در یک سلول با توجه به ناهمگنی موجود در آن متفاوت است. ولی بر اساس مدل اولرین فرض بر آن است که نیروی درگ یکسانی به ذرات موجود در یک سلول وارد می شود [۲۶]. دلیل دیگر نیز در خود روابط بکار گرفته شده در محاسبه نیروی درگ نهفته است. این روابط نیمه تجربی هستند و خود دارای خطا میباشند. دلیل دیگر را میتوان به فرض در نظر گرفتن فاز فرات بعنوان یک فاز پیوسته و استفاده از نظریه جنبشی جریان گرانولار به میدهند نوع مدل های بکارگرفته شده و تئوری جنبشی جریان گرانولار برای فاز جامد با وجود اینکه در دسته کامل ترین مدل های موجود در زمینه پیش بینی خواص فاز جامد قرار می گیرد، اما همچنان دارای کاستیهایی است که باعث میشود که نتایج شبیه سازی دچار خطا شود [۲۸, ۲۸].

بنابراین و با بررسی دادههای شبیه سازی مشاهده شد اختلافاتی بین توزیع اندازهی حبابهای دادههای حاصل از شبیه سازی و دادههای ۵ (الف) حبابهای با قطر کوچک تعداد قابل توجهی از حبابها را به خود اختصاص دادهاند. همچنین با مقایسه دو شکل مشاهده میشود با افزایش سرعت، قطر حبابهای تشکیل شده افزایش مییابد. در سرعت ۲/۴ برابر حداقل سرعت سیالیت بیشتر حبابها دارای قطر ۲/۵ الی ۳ سانتی متری و در سرعت ۵ برابر حداقل سرعت سیالیت بیشتر حبابها دارای قطر ۲/۵ الی ۴ سانتی متری میباشند. توزیع اندازه حبابها در ارتفاع ۲۷۰ میلیمتری نیز برای سرعت ۵ برابر حداقل سرعت سیالیت در شکل ۶ (ب) آورده شده است. همانند شکل ۵ (ب) مربوط به ارتفاع ۲۷۰ میلیمتری در سرعت ۴/۲ برابر حداقل سرعت سیالیت، در نمودارهای مربوط به سرعت ۵ برابر حداقل سرعت سیالیت نیز با افزایش ارتفاع حبابهای بزرگتری مشاهده میشود.

همانطور که دیده شد، مدل در پیش بینی توزیع اندازه حبابها موفقیت نسبی دارد و اگرچه تطابق کاملی میان دادههای آزمایشگاهی و پیش بینی مدل وجود ندارد اما روند تغییرات بسیار نزدیک است. یکی از دلایل اختلاف بین دادههای آزمایشگاهی و شبیه سازی ناشی از محاسبه نیروی درگ است. چرا که با توجه به ماهیت نوع مدل سازی که خواص در یک سلول متوسط گیری



شکل ۷. میانگین قطر حبابها در ارتفاعات ۹۰، ۱۸۰ و ۲۷۰ میلیمتری از کف بستر و سرعت (الف) ۳/۴ و (ب) ۵ برابر حداقل سرعت سیالیت بین داده های شبیه سازی و آزمایشگاهی[۲۱]: ارتفاع راکتور: ۸۰۰ میلیمتر، عرض راکتور: ۱۸۰ میلیمتر، ارتفاع اولیه بستر: ۳۶۰ میلیمتر، قطر ذرات جامد: ۲۵۰ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۲۵۰۰ kg/m^۳، حداقل سرعت سیالیت:۵/۲۴ cm/s، گاز ورودی: هوا

Fig. 7. The average diameter of the bubbles at heights of 90, 180 and 270 mm from the bottom of the bed and the velocity (a) 3.4 and (b) 5 times the minimum fluidization velocity between simulation and experimental data [21]: Reactor height: 800 mm Reactor width: 180 mm, initial bed height: 360 mm, diameter of solid particles: 250 microns, density of solid particles: 2500 kg/m3, minimum fluidization velocity: 5.24 cm/s, inlet gas: air

مختلف میباشند در شکلهای ۸ و ۹ آورده شده است. مطابق با شکل ۸ که مربوط به میدانهای کسر حجمی ذرات جامد در زمانهای مختلف برای راکتور بازل میباشد مشاهده میشود بستر در ابتدا و تا ارتفاع مشخصی از ذرات جامد با کسر حجمی معلوم پر شده است و پس از آن گاز ورودی از پایین وارد بستر شده و به مرور باعث حرکت ذرات جامد میشود به طوری که مطابق با شکل ۸ در زمان ۵ ثانیه بستر به حالت سیالیت رسیده است. شکل ۹ نیز میدانهای کسر حجمی ذرات جامد در راکتور میتسویی را نشان میدهد. مطابق با این شکل نیز بستر به مرور با وارد شدن فاز گاز با سرعتی بیشتر از حداقل سرعت سیالیت ذرات جامد باعث شناور شدن و سیالیت آنها میشود.

قبل از مقایسه هیدرودینامیکی دو راکتور الگوی جریانی فاز گاز مورد مطالعه قرار گرفت. به منظور بررسی الگوی جریان گازی از نسبت دبی حجمی جریان حبابی به مجموع دبیهای حجمی جریان حبابی و جریان امولسیون استفاده شده است. در راکتورهای بستر سیال گاز–جامد، جریان فاز گازی برای عبور از بستر یا از فاز امولسیون به سمت بالا حرکت میکند و یا از میان حبابهای تشکیل شده. هنگامی که جریان گازی از فاز امولسیون آزمایشگاهی وجود دارد. حال سوال اینجاست که بهطور متوسط اندازهی حبابها در نتایج آزمایشگاهی و نتایج حاصل از مدل تا چه اندازه با هم مطابقت دارند. در شکل ۷ مقایسه بین میانگین قطر حبابها در ارتفاعات مختلف از بستر راکتور و در سرعتهای ۳/۴ و ۵ برابر حداقل سرعت سیالیت انجام گرفته است. در این شکل محور افقی ارتفاع بستر و محور عمودی میانگین قطر حبابها میباشد. همچنین بازههای مشخص شده مربوط به سطح اطمینان ۹۰ درصد نتایج حاصل از شبیه سازی میباشند. همانطور که در شکل مشخص است، در ارتفاعات مختلف از کف بستر، میانگین قطر حبابها در هر دو سرعت اختلاف کمی با دادههای آزمایشگاهی داشته و دادههای شبیه سازی در رنج قابل قبول سطح اطمینان ۹۰ درصد قرار دارند.

۳-۳- مقایسه هیدرودینامیکی دو تکنولوژی مختلف

هر دو راکتور به صورت ۳ بعدی و مطابق با توضیحات آورده شده در بخش مدلسازی و شبیه سازی، شبیه سازی شده و میدانهای خروجی از نرم افزار شبیه ساز نیز که نشان دهندهی کسر حجمی ذرات جامد در زمانهای



شکل ۸. میدانهای کسر حجمی ذرات جامد حاصل از شبیه سازی راکتور صنعتی مورد استفاده در تکنولوژی بازل در زمانهای مختلف. قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۹۱۸ kg/m^۲ ، سرعت گاز ورودی:۰/۶۱ m/s ویسکوزیته گاز ورودی:Pa.s ^{۵۰} ۸۵۱ × ۱/۱۰ ، جرم مولکولی گاز ورودی:۴۰/۶۸ gr/mol

Fig. 8. Contour of volume fraction of solid particles obtained from the simulation of the industrial reactor used in Basell technology at different times. Diameter of solid particles: 1685 microns, density of solid particles: 918 kg/m³, inlet gas velocity: 0.61 m/s, inlet gas viscosity: 1.85 x 10⁻⁵ Pa.s, inlet gas molecular weight:40.68 gr/mol



شکل ۹. میدانهای کسر حجمی ذرات جامد حاصل از شبیه سازی راکتور صنعتی مورد استفاده در تکنولوژی میتسویی در زمانهای مختلف. قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۹۱۸ kg/m^۲، سرعت گاز ورودی:۰/۶۱ m/s ، ویسکوزیته گاز ورودی:Pa.s ^۵ م ۱۸۵ × ۱/۱۰ ، جرم مولکولی گاز ورودی:۴۰/۶۸ gr/mol

Fig. 9. Contour of volume fraction of solid particles obtained from the simulation of the industrial reactor used in Mitsui technology at different times. Diameter of solid particles: 1685 microns, density of solid particles: 918 kg/m³, inlet gas velocity: 0.61 m/s, inlet gas viscosity: 1.85 x 10⁻⁵ Pa.s, inlet gas molecular weight:40.68 gr/mol



شکل ۱۰. بررسی درصد عبور جریان گازی از جریان حبابی در راکتورهای بازل و میتسویی

Fig. 10. Investigating the bubble passage ratio in Basell and Mitsui reactors

می گذرد با فاز جامد در تماس قرار می گیرد ولی هنگامی که از میان حبابها می گذرد با کمترین تماس با فاز جامد و از طریق حبابهای تشکیل شده به سمت بالا حرکت می کند. در این پژوهش و به منظور بررسی الگوی جریان فاز گاز از درصد جریان گازی که از حبابهای تشکیل شده عبور می کند^۱ استفاده شده است. مطابق شکل ۱۰، درصد دبی حجمی جریان حبابی در ارتفاعات نرمال مختلف در دو راکتور بازل و میتسویی رسم شده است. ارتفاع نرمال نسبت فاصله از کف راکتور به ارتفاع منبسط شدهی بستر در حالت سیالیت می باشد.

در هر دو شکل با افزایش ارتفاع، درصد جریان حبابی افزایش یافته است. این بدان معناست که جریان حبابی در پایین بستر که ذرات جامد بیشتری وجود دارد کمتر بوده و در این نواحی اکثرا فاز امولسیون وجود داشته و فاز گاز با عبور از آن با فاز جامد تماس برقرار می کند. اما رفته رفته و با افزایش ارتفاع جریان حبابی بیشتر شده و گاز بیشتر از نواحی حبابی عبور می کند.

در ادامه به مقایسه هیدرودینامیکی دو راکتور با استفاده از میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز در محور شعاعی و همچنین میانگین زمانی سرعت ذرات جامد در جهت محوری راکتور پرداخته میشود.

با توجه به اینکه هیدرودینامیک تحت تاثیر شرایط عملیاتی شامل دما، فشار و همچنین دبی قرار میگیرد و با در نظر گرفتن اینکه در راکتورهای

صنعتی بستر سیال پلی اتیلن سبک خطی (با رجوع به مدارک فنی)، درصد تبدیل مونومر گازی بین ۵ تا ۷ درصد است، نتیجه می شود واکنش شیمیایی تاثیر اندکی بر روی دما، فشار و دبی دارد. بنابراین در این پژوهش از تاثیر واکنش شیمیایی بر هیدرودینامیک چشم پوشی شده است.

۳– ۳– ۱– کسر حجمی گاز

به منظور مقایسه هیدرودینامیکی راکتورهای بستر سیال، یکی از موضوعات مهم، بررسی توزیع کسر حجمی گاز در راکتور میباشد زیرا بیانگر تماس ذرات گاز و جامد میباشد. هر چه توزیع ذرات جامد در طول راکتور یکنواخت تر باشد، تماس بین فازها نیز با کیفیت بالاتری انجام میگیرد و در نتیجهی آن شرایط انتقال جرم و حرارت یکنواخت تری در راکتور وجود خواهد داشت. در شکل ۱۰ مقایسه میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز از زمان ۱۰ تا ۳۰ ثانیه در ارتفاعهای نرمال مختلف راکتور انجام گرفته است. در این شکلها محور افقی فاصله از مرکز راکتور و در جهت شعاعی میباشد و محور نشان میدهد. در این شکلها همچنین محور مربوط به همزن مورد استفاده نشان میدهد. در این شکلها همچنین محور مربوط به همزن مورد استفاده مطابق با شکل ۱۱ (الف)، در ارتفاع نرمال ۲۰ تا ۲۰ تفاوت چندانی بین

توزیع گاز در دو راکتور مختلف دیده نمی شود و تنها راکتور میتسویی

¹ Bubble Passage Ratio



شکل ۱۱. مقایسه ی میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز (از زمان ۱۰ تا ۳۰ ثانیه) در جهت شعاعی و در دو راکتور مختلف (بازل و میتسویی) و در ارتفاع های نرمال مختلف ((الف) ۰/۲۴، (ب) ۰/۴۸، (ج) ۱/۷۲، (د): ۰/۹۶) در قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۹۱۸ kg/m^۲، سرعت گاز ورودی:۱۸۶ gr/mol مولکولی گاز ورودی:۱۰/۵ gr/mol ه- ۱/۱۰ مار ۲۰/۱۸ ، جرم مولکولی گاز ورودی:۴۰/۶۸ gr/mol

Fig. 11. Comparison of the time average of the volume fraction of the gas phase (from 10 to 30 seconds) in the radial direction and in two different reactors (Basell and Mitsui) and at different normal heights ((a) 0.24, (b) 0.48, (c) 0.72, (d): 0.96) in diameter of solid particles: 1685 microns, density of solid particles: 918 kg/m³, inlet gas velocity: 0.61 m/s, inlet gas viscosity: 1.85 x 10⁻⁵ Pa.s, inlet gas molecular weight:40.68 gr/mol

یکنواختی توزیع گاز کمی بهتر را از خود نشان میدهد. به منظور بررسی عددی و دقیق تر نیز می توان از مقایسه ی ضریب تغییر ^{(۱} که از رابطه ی زیر محاسبه می شود استفاده کرد.

$$CoV = \frac{\text{Standard Devation}}{\text{Average}} \times \dots$$
 (11)

این پارامتر یکنواختی یک توزیع را نشان میدهد. هرچه این کمیت به عدد صفر درصد نزدیکتر باشد توزیع یکنواختتر و هر چه به عدد ۱۰۰ درصد نزدیکتر باشد جریان غیر یکنواختتر خواهد بود. پس از محاسبهی ضریب تغییر در دو راکتور مختلف مشاهده شد که ضریب تغییر مربوط به دو راکتور بازل و میتسویی در ارتفاع نرمال ۰/۲۴ (شکل ۱۱ (الف)) به ترتیب برابر ۵ و ۷ درصد میباشد که همانطور که در شکل نیز مشخص بود کیفیت تماس و یکنواختی دو فاز در راکتور تکنولوژی میتسویی کمی بهتر از راکتور تکنولوژی بازل میباشد.

مطابق با شکل ۱۱ (ب)، در ارتفاع نرمال ۰/۴۸ ، برخلاف ارتفاع نرمال ۰/۲۴ تفاوت بیشتری بین میانگین توزیع کسر حجمی فاز گاز وجود داشته و مطابق با شکل، کسر حجمی فاز گاز در راکتور میتسویی یکنواخت تر می باشد. همانطور که در شکل نیز مشاهده می شود، کسر حجمی فاز گاز در راکتور تکنولوژی میتسویی سریع تر به یکنواختی می رسد و در طول شعاع راکتور کیفیت تماس بهتری بین دو فاز اتفاق می افتد. همچنین با محاسبه ی ضریب تنییر نیز مشاهده شد که ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسویی به ترتیب برابر ۰/۵ و ۲/۸ درصد می باشد که نسبت به ارتفاع قبلی تفاوت بیشتری را نشان می دهد.

در ارتفاع نرمال ۲/۷۲ مطابق با شکل ۱۱ (ج)، میانگین زمانی توزیع گاز در دو راکتور بسیار نزدیک به یکدیگر میباشد. مطابق با این شکل، توزیع بسیار خوبی در دو راکتور وجود داشته و در این ارتفاع کیفیت تماس بین دو فاز در هر دو راکتور بسیار بالا میباشد. با محاسبه ی ضریب تغییر نیز میتوان یکنواختی هر دو راکتور را مشاهده کرد. پس از بررسی مشاهده شد، ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسویی در این ارتفاع به ترتیب برابر ۴/۹ و ۴/۹ درصد میباشد که نسبت به دو ارتفاع قبلی اختلاف کمتری مشاهده میشود. در نهایت و در ارتفاع نرمال ۹۶/۶ و مطابق شکل ۱۱ (د) نیز مشاهده میشود تماس دو فاز در راکتور تکنولوژی میتسویی با اختلاف کمی از کیفیت

در شکل ۱۲ به بررسی ضریب تغییر مربوط به میانگین کسر حجمی فاز گاز پرداخته شده است. در این شکل محور افقی نسبت فاصله از کف بستر به ارتفاع منبسط شدهی بستر درحالت سیالیت (ارتفاع نرمال شده) و محور عمودی مقدار ضریب تغییر را نشان میدهند. مطابق با شکل ۱۲ با افزایش ارتفاع از کف بستر در راکتور میتسویی رفته رفته توزیع دو فاز یکنواخت تر شده و کیفیت تماس بین دو فاز بیشتر میشود. همچنین در راکتور تکنولوژی بازل نیز این روند تقریبا مشابه میباشد.

همانطور که در شکلهای ۱۱ و ۱۲ مشاهده شد، کیفیت تماس ذرات جامد و مونومر گازی در تکنولوژی میتسویی بیشتر از تکنولوژی بازل بوده و این کیفیت با فاصله از کف بستر نیز بیشتر میشود. بنابراین وجود همزن علاوه بر شکستن کلوخهها و جلوگیری از چسبیدن ذرات پلیمر به یکدیگر باعث بهبود کیفیت تماس بین دو فاز و یکنواختی جریان دو فاز میشود.

با افزایش کیفیت و یکنواختی تماس دوفاز، انتقال جرم و انرژی نیز به صورت یکنواخت تری در قسمت های مختلف راکتور انجام خواهد گرفت و باعث کنترل پذیری بهتر فرآیند می شود. هنگامی که ذرات جامد کاتالیست توزیع یکنواختی در راکتورهای پلیمریزاسیون نداشته باشند، فاز گاز که تمایل به طی کردن مسیری کم فشار را دارد، از مناطق چگال کمتر عبور کرده و در آن نقاط تماس کمی بین دوفاز انجام خواهد گرفت که نتیجهی آن کاهش نرخ تولید پلیمر می شود. همچنین در نقاطی که تراکم ذرات جامد کمتر است، به دلیل کاهش نسبت سطح تماس گاز–جامد نرخ پلیمر تولیدی کاهش پیدا می کند. در نتیجه سبب غیر یکنواختی انتقال انرژی و جرم در کل بستر می شود. بنابراین کیفیت تماس دو فاز از اهمیت بالایی برخوردار می باشد.

مطابق با بررسیهای انجام گرفته بر روی میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز در محور شعاعی دو راکتور مورد استفاده در تکنولوژیهای بازل و میتسویی و در ارتفاعات مختلف، مشاهده شد در ارتفاعات پایین تفاوت محسوسی بین یکنواختی فاز گاز که بیانگر کیفیت تماس دو فاز میباشد، وجود ندارد. اما با فاصله گرفتن از کف بسترها و در ارتفاعات بالاتر مطابق با شکل ۱۱ و ۱۲، فاز گاز در تکنولوژی میتسویی به صورت یکنواخت تری با ذرات جامد در تماس است که این یکنواختی بیشتر باعث افزایش کیفیت

بالاتری برخوردار میباشد و همچنین در این ارتفاع هر دو راکتور توزیع بسیار خوبی را نشان میدهند. در این ارتفاع ضریب تغییر راکتور تکنولوژی بازل و میتسویی به ترتیب برابر ۴/۰ و ۳/۱ درصد میباشد که همانطور که از شکل نیز مشخص است، در این ارتفاع هر دو راکتور یکنواختی بیشتری نسبت به ارتفاعات پایین تر از خود نشان میدهند.

¹ CoV: Coefficient of Variation



شکل ۱۲. مقایسه ی مقدار ضریب تغییر مربوط به میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز برحسب ارتفاع نرمال راکتور و در دو راکتور مختلف (بازل و میتسویی). قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد:۹۱۸ kg/m^۲، سرعت گاز ورودی:۰/۶۱ m/s، ویسکوزیته گاز ورودی:Pa.s ۴۰/۶۸ gr/mol، جرم مولکولی گاز ورودی:۱/۱۰

Fig. 12. Comparison of the CoV value related to the time average of the volume fraction of the gas phase according to the normal height of the reactor and in two different reactors (Basell and Mitsui). Diameter of solid particles: 1685 microns, density of solid particles: 918 kg/m3, inlet gas velocity: 0.61 m/s, inlet gas viscosity: 1.85 x 10-5 Pa.s, inlet gas molecular weight:40.68 gr/mol

تماس دو فاز گاز و جامد می شود.

۳- ۳- ۲- سرعت ذرات جامد

کیفیت حرکت ذرات جامد نیز یکی از پارامترهای بسیار مهم در هیدرودینامیک راکتورهای بستر سیال میباشد. میتوان با بررسی سرعت میانگین ذرات جامد کیفیت حرکت آنها را مورد بررسی قرار داد. در شکل ۱۳ میانگین زمانی سرعت حرکت ذرات جامد در جهت محوری و در ارتفاعات نرمال شدهی مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. در این شکل محور افقی فاصلهی شعاعی نرمال شده از مرکز راکتور و محور عمودی میانگین زمانی سرعت محوری ذرات جامد میباشد. در این شکل، نمودارهای (الف)، (ب)، سرعت محوری ذرات جامد میباشد. در این شکل، نمودارهای (الف)، (ب)، همانطور که در شکل مشخص است نحوهی حرکت ذرات جامد در دو راکتور تقریبا مشابه یکدیگر است یعنی در هر دو راکتور ذرات جامد در نزدیکی دیواره حرکت رو به سمت پایین و در مرکز به سمت بالا حرکت میکنند.

با توجه به اینکه ذرات جامد با حرکت خود منجر به اختلاط در فاز جامد میشوند، بنابراین میتوان با بررسی شدت حرکت ذرات جامد، اختلاط در فاز

گاز را مورد مطالعه قرار داد. بدین منظور سرعت ذرات جامد در ارتفاعهای نرمال مختلف و در جهت شعاعی در دو راکتور مورد قیاس قرار گرفت. با توجه به مقدار سرعتها، مشاهده می شود در ارتفاع نرمال ۲۴/۰ شدت حرکت ذرات جامد در راکتور میتسویی با اختلاف بسیار کمی بیشتر از راکتور بازل می باشد اما با فاصله گرفتن از کف بستر و مطابق شکل ۱۳ در ارتفاعات نرمال ۲۴/۰ و ۲۲/۰ شدت حرکت ذرات جامد در راکتور تکنولوژی بازل بیشتر شده به طوری که در ارتفاع نرمال ۲۲/۰ (شکل ۱۳ (ج)) بیشترین مقدار سرعت ذرات جامد تقریبا برابر ۲ متر بر ثانیه و دو برابر بیشتر از بیشترین سرعت ذرات جامد در تکنولوژی میتسویی که تقریبا برابر ۲ متر بر ثانیه است، می باشد.

این بیشتر بودن سرعت حرکت ذرات جامد در تکنولوژی بازل نشان از اختلاط بیشتر ذرات جامد میدهد. این اختلاف در نیمهی بالایی بستر (در ارتفاع نرمال ۰/۷۲) بیشتر از سایر ارتفاعات بوده و نشان از اختلاط شدید دو فاز در این ارتفاع دارد.

در راکتور تکنولوژی بازل با توجه به وجود حبابهای بزرگتر، سرعت حرکت فاز گاز در جهت محوری راکتور بیشتر بوده و گاز با سرعت بالاتری



شکل ۱۳. مقایسهی میانگین زمانی سرعت حرکت ذرات جامد (از زمان ۱۰ تا ۳۰ ثانیه) در جهت محوری در دو راکتور مختلف (بازل و میتسویی) و در ارتفاعهای نرمال مختلف ((الف) ۲۴/۰۰ (ب) ۲/۴۸ (ج) ۲/۰۱ (د): ۰/۹۶) قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: ۹۱۸ kg/m^۲، سرعت گاز ورودی:۰/۶۱ m/s ویسکوزیته گاز ورودی: ۱۸۵ م ۱/۱۰ ، جرم مولکولی گاز ورودی:۴۰/۶۸ gr/mol

Fig. 13. Comparison of the time average velocity of solid particles (from 10 to 30 seconds) in the axial direction in two different reactors (Basell and Mitsui) and at different normal heights ((a) 0.24, (b) 0.48 (c) 0.72, (d): 0.96): Diameter of solid particles: 1685 microns, density of solid particles: 918 kg/m3, inlet gas velocity: 0.61 m/s, inlet gas viscosity: 1.85 x 10-5 Pa.s, inlet gas molecular weight:40.68 gr/mol

ارتفاع بستر را طی می کند. با توجه به اینکه در راکتورهای بستر سیال فاز گاز با حرکت خود ذرات جامد را با خود به سمت بالا می برد و سبب حرکت ذرات جامد می شود، بنابراین می توان نتیجه گرفت که سرعت حرکت ذرات جامد در این راکتور بیشتر از راکتور میتسویی می باشد که مطابق با نتایج حاصل از شبیه سازی نیز این موضوع به وضوح دیده شد.

پس از بررسی میانگین زمانی سرعت ذرات جامد در جهت شعاعی و در ارتفاعات مختلف دو راکتور مشاهده شد شدت حرکت ذرات جامد در تکنولوژی بازل بالاتر از راکتور مورد استفاده در تکنولوژی میتسویی میباشد. بنابراین نتیجه میشود در راکتور تکنولوژی میتسویی اگرچه همزن مورد استفاده سبب افزایش کیفیت تماس دو فاز میشود، اما از شدت حرکت ذرات جامد کاسته و میزان اختلاط در فاز جامد را کاهش میدهد.

۴– نتیجه گیری

در این پژوهش به بررسی هیدرودینامیکی راکتورهای بستر سیال مورد استفاده در فرآیند تولید پلی اتیلن سبک خطی در دو لیسانس مختلف بازل و میتسویی پرداخته شد. در راکتور تکنولوژی میتسویی برخلاف تکنولوژی بازل از یک همزن برای جلوگیری از چسبیدن ذرات پلیمر به دیواره و همچنین شکستن کلوخههای تشکیل شده استفاده میشود. به منظور بررسی و مقایسهی هیدرودینامیکی دو تکنولوژی مذکور در مقیاس صنعتی از ابزار دینامیک سیالات محاسباتی و مدل دو فازی همراه با تئوری جنبشی جریان گرانولی استفاده شد.

بدین منظور ابتدا عملیات استقلال از شبکه با دو روش مختلف انجام پذیرفت. مشاهده شد با انتخاب سایز سلول ۱۰ برابر قطر ذرات جامد، می توان با تقریب خوب و هزینه ی محاسباتی قابل تحمل رفتار هیدرودینامیکی بستر را پیش بینی کرد. سپس با استفاده از دادههای آزمایشگاهی یک مدل هیدرودینامیکی توسعه داده شد و پس از اطمینان از اعتبار مدل به شبیه سازی راکتورهای مورد استفاده در تکنولوژیهای بازل و میتسویی در مقیاس صنعتی پرداخته شد. به منظور مقایسه ی هیدرودینامیکی دو راکتور، با توجه به اهمیت بالای کیفیت تماس و اختلاط دو فاز، به ترتیب از میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز در جهت شعاعی و در ارتفاعات مختلف بستر و همچنین میانگین زمانی سرعت محوری ذرات جامد در ارتفاعات مختلف بستر استفاده شد.

با بررسی میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز در محور شعاعی و در

ارتفاعات نرمال مختلف مشاهده شد در ارتفاعات پایین بستر توزیع کسر حجمی فاز گاز در راکتور میتسویی بهتر از راکتور تکنولوژی بازل بوده و در نتیجه کیفیت تماس دو فاز در این راکتور بالاتر خواهد بود. در ارتفاع نرمال ۲۰/۲۴ مشاهده شد ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسویی به ترتیب برابر ۷ و ۵ درصد میباشد که نشان از اختلاف دو درصدی دو راکتور میدهد. همچنین در ارتفاعات نرمال دیگر به بررسی میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز پرداخته شد و مشاهده شد در هر دو راکتور با افزایش ارتفاع از کف بستر، کیفیت تماس دو فاز تقریبا روند افزایشی داشته به طوری که در ارتفاع تغییر راکتورهای بازل و میتسویی بسیار پایین و برابر با ۲۰٫۴ و ۳/۱ درصد میباشد. همچنین مشاهده شد در همهی ارتفاعات نرمال بستر مقدار ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسویی بسیار پایین و برابر با ۲۰٫۴ و ۳/۱ درصد میباشد. همچنین مشاهده شد در همهی ارتفاعات نرمال بستر مقدار ضریب بالاتر دو فاز در این راکتور میباشد.

بنابراین همزن مورد استفاده در تکنولوژی میتسویی علاوه بر جلوگیری از چسبیدن ذرات پلیمر به دیواره و شکستن کلوخهها، به کیفیت تماس و یکنواختی فازهای گاز و جامد کمک شایانی میکند و واکنش پلیمریزاسیون که منجر به تولید پلیمر میشود با کیفیت بالاتری در این راکتور انجام میپذیرد.

به منظور بررسی اختلاط ذرات جامد نیز از میانگین زمانی سرعت محوری ذرات جامد در ارتفاعات مختلف بستر استفاده شد. مشاهده شد شدت حرکت ذرات جامد در ارتفاعات مختلف بستر در راکتور بازل بیشتر از راکتور میتسویی بوده به طوری که در ارتفاع ۲/۲۲ برابری نسبت به ارتفاع منبسط شدهی بستر درحالت سیالیت، بیشترین سرعت حرکت ذرات جامد در تکنولوژی بازل تقریبا دو برابر تکنولوژی میتسویی میباشد. این بیشتر بودن سرعت حرکت ذرات منجر به شدت اختلاط بالاتر ذرات جامد در این راکتور میشود.

در نتیجه با مقایسهی هیدرودینامیکی دو راکتور مختلف مشاهده شد که کیفیت و یکنواختی تماس دو فاز در راکتور مورد استفاده در تکنولوژی میتسویی بالاتر از راکتور بازل می باشد. از طرفی با بررسی شدت حرکت ذرات جامد در جهت محوری راکتورها مشاهده شد ذرات جامد در راکتور بازل با سرعت بالاتری در جهت محوری در حرکت بوده و منجر به اختلاط بهتر ذرات جامد نسبت به راکتور میتسویی می شوند.

۵- فهرست علائم

علائم انگلیسی

large-volume materials for the 21st century, Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry, 42(3) (2004) 396-415.

[1] P. Galli, G. Vecellio, Polyolefins: The most promising

- [2] S. Schneiderbauer, S. Puttinger, S. Pirker, P. Aguayo, V. Kanellopoulos, CFD modeling and simulation of industrial scale olefin polymerization fluidized bed reactors, Chemical Engineering Journal, 264 (2015) 99-112.
- [3] D. Jeremic, Polyethylene, Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry, (2000) 1-42.
- [4] F.A. Fernandes, L.M. Lona, Heterogeneous modeling for fluidized-bed polymerization reactor, Chemical Engineering Science, 56(3) (2001) 963-969.
- [5] A. Farhangiyan Kashani, H. Abedini, M.R. Kalaee, Simulation of an industrial linear low density polyethylene plant, Chemical Product and Process Modeling, 6(1) (2011).
- [6] M. Khan, M. Hussain, Z. Mansourpour, N. Mostoufi, N. Ghasem, E. Abdullah, CFD simulation of fluidized bed reactors for polyolefin production–A review, Journal of Industrial and Engineering Chemistry, , 20(6) (2014) 3919-3946
- [7] K. Jang, Y. Feng, H. Li, Investigation of Bubble Behavior in Gas-Solid Fluidized Beds with Different Gas Distributors, Chemical Engineering & Technology, 44(4) (2021) 723-731.
- [8] X.-Z. Chen, D.-P. Shi, X. Gao, Z.-H. Luo, A fundamental CFD study of the gas–solid flow field in fluidized bed polymerization reactors, Powder Technology, 205(1-3) (2011) 276-288.
- [9] P. Xu, Y. Li, Y. Wang, Y. Liu, Q. Zhang, G. Chang, Gassolid mixing characteristics of Geldart B particles in a fluidized bed with different height-to-diameter ratios, in: Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing, 2021, pp. 012166.
- [10] J. Sun, Y. Zhou, C. Ren, J. Wang, Y. Yang, CFD simulation and experiments of dynamic parameters in gas-solid fluidized bed, Chemical engineering science,

منابع

m ارتفاع، H D قطر، D سرعت، M/s

- Pa فشار، P
- ۔ t زمان، S
- ۲ رسی و Re عدد رینولدز
- m قطر ذرات، *d*
- تابع توزيع شعاعى g_0
- m ارتفاع اوليه بستر، *H*₀
 - مید فرود *Fr*
 - رگ خریب درگ CD
- m/s² شتاب گرانش، g
- *∆P* اختلاف فشار، Pa
- *e* ضريب برخورد
- m/s نوسانات سرعت، u'
 - m/s سرعت حد، v_{r,s}

علائم يونانى

- $\,\mathrm{kg/m^3}\,$ چگالى، ho
- ضريب تبادل مومنتوم eta
- ${
 m m}^2/{
 m s}^3$ نرخ از بین رفتن انرژی جنبشی، γ
 - ${
 m m}^2/{
 m s}^2$ دمای گرانولی، $heta^2$
 - زاويه برخورد، arphi
 - $kg/m^2~s^{-1}$ ويسكوزيته بالک، λ
 - Pa. S ويسكوزيته، μ
 - ع کسر حجمی
 - Pa تنسور تنش، $\overline{\tau}$
- (K-m)/W، ضریب نفوذ دمای گرانولی K

زيرنويس

- g فاز گاز s فاز جامد
- s فاز جامد b حباب
- min کمترین
- kinetic سينتيک

بالانويس

* شرايط مرجع

using fine-grid CFD simulations based on the two-fluid model, Powder Technology, 299 (2016) 185-198.

- [21] A. Busciglio, G. Vella, G. Micale, L. Rizzuti, Analysis of the bubbling behaviour of 2D gas solid fluidized beds: Part II. Comparison between experiments and numerical simulations via digital image analysis technique, Chemical Engineering Journal, 148(1) (2009) 145-163.
- [22] P.J. Roache, Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics, Annual review of fluid Mechanics, 29(1) (1997) 123-160.
- [23] spatconv @ www.grc.nasa.gov, (n.d.). https://www. grc.nasa.gov/www/wind/valid/tutorial/spatconv.html (reached April 2024)
- [24] R.C. Darton, L. RD, D. JF, D. Harrison, BUBBLE GROWTH DUE TO COALESCENCE IN FLUIDISED BEDS, 55 (1977) 274-280.
- [25] H. Norouzi, N. Mostoufi, Z. Mansourpour, R. Sotudeh-Gharebagh, J. Chaouki, Characterization of solids mixing patterns in bubbling fluidized beds, Chemical Engineering Research and Design, 89(6) (2011) 817-826.
- [26] T. Li, L. Wang, W. Rogers, G. Zhou, W. Ge, An approach for drag correction based on the local heterogeneity for gas–solid flows, AIChE Journal, 63(4) (2017) 1203-1212.
- [27] D. Patil, M. van Sint Annaland, J. Kuipers, Critical comparison of hydrodynamic models for gas–solid fluidized beds—Part I: bubbling gas–solid fluidized beds operated with a jet, Chemical engineering science, 60(1) (2005) 57-72.
- [28] L.L. Yang, J.J. Padding, J.H. Kuipers, Modification of kinetic theory of granular flow for frictional spheres, part II: Model validation, Chemical Engineering Science, 152 (2016) 783-794.

66(21) (2011) 4972-4982.

- [11] S. Debnath, H. Nath, V. Chauhan, CFD modeling of a typical fluidized bed column, Materials Today: Proceedings, 46 (2021) 6178-6184.
- T.B. Anderson, R. Jackson, Fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of motion, Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 6(4) (1967) 527-539.
- [13] M. Syamlal, T.J. O'Brien, Computer simulation of bubbles in a fluidized bed, in: AIChE Symp. Ser, Publ by AIChE, 1989, pp. 22-31.
- [14] C.K. Lun, S.B. Savage, D. Jeffrey, N. Chepurniy, Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield, Journal of fluid mechanics, 140 (1984) 223-256.
- [15] D. Gidaspow, Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions, Academic press, 1994.
- [16] P.C. Johnson, R. Jackson, Frictional–collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing, Journal of fluid Mechanics, 176 (1987) 67-93.
- [17] J. Sinclair, R. Jackson, Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions, AIChE journal, 35(9) (1989) 1473-1486.
- [18] D.Z. Zhang, R.M. Rauenzahn, A viscoelastic model for dense granular flows, Journal of Rheology, 41(6) (1997) 1275-1298
- [19] D.G. Schaeffer, Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow, Journal of differential equations, 66(1) (1987) 19-50.
- [20] A. Bakshi, C. Altantzis, R. Bates, A. Ghoniem, Study of the effect of reactor scale on fluidization hydrodynamics

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم P. Karimzadeh Soureshjani, H. R. Norouzi, Hydrodynamic investigation of industrial gasphase polyethylene reactors in two different technologies, Amirkabir J. Mech Eng., 56(4) (2024) 517-542.



DOI: 10.22060/mej.2024.22927.7693

بی موجعه محمد ا