

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

* عهده دار مکاتبات: h.norouzi@aut.ac.ir

چکیده

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 ملاحظه‌ای بر روی واکنش پلیمریزاسیون دارد. در این پژوهش رفتار هیدرودینامیکی دو راکتور تحت لیسانس شرکت های بازل و میتسویی، با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور از مدل دو فازی با تئوری جنبشی جریان گرانیولی 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 به طوری که در ارتفاع نرمال ۰/۹۶، همگنی فازها به بیشترین مقدار می‌رسد. در این ارتفاع ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسویی به ترتیب برابر ۴/۰ و ۳/۱ درصد بوده و 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 می‌باشد. علاوه بر این، میانگین زمانی سرعت محوری ذرات جامد نیز در ارتفاعات مختلف نشان داد که شدت حرکت ذرات جامد در راکتور بازل بالاتر است به طوری که در ارتفاع نرمال ۰/۷۲ سرعت محوری ذرات جامد در راکتور بازل تقریباً ۲ متر بر ثانیه و در راکتور میتسویی تقریباً ۱ متر بر ثانیه می‌باشد. با توجه به پارامتر سرعت محوری می‌توان گفت که کیفیت اختلاط ذرات جامد در راکتور بازل بیشتر از راکتور میتسویی است.

واژه‌های کلیدی:

دینامیک سیالات محاسباتی، پلیمریزاسیون اتیلن، مدل سازی اولری، راکتور بستر سیال، اوپن فوم

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 ۱۵۰-۳۵۰ مگاپاسکال دارند. 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 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 می‌گیرد [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. تقریباً 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.

یکی از تکنولوژی‌های مطرح، فرآیند اسفریلین^۱ می‌باشد که تحت لیسانس شرکت بازل^۲ 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^۳ 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 می‌شود [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 می‌کند که ذرات جامد کمتری

¹ Spherilene

² LyondellBasell

³ Mitsui

وجود دارد و این باعث می‌شود که گاز بدون واکنش از راکتور خارج شود. این خود باعث کاهش بازده، تولید محصول غیر یکنواخت و همچنین کنترل دمایی دشوار راکتور می‌شود. 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 هیدرودینامیک 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 در نظر گرفته می‌شوند و معادلات پیوستگی و اندازه حرکت برای هر دو فاز در نظر گرفته می‌شود. با توجه به حجم بسیار زیاد محاسبات مربوط به روش اولر-لاگرانژ، از این روش برای شبیه‌سازی راکتورهای صنعتی استفاده نمی‌شود [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 کننده‌ی مختلف گاز پرداختند. آن‌ها نتیجه گرفتند که بهم پیوستن حباب‌ها در نزدیکی توزیع کننده گاز با کاهش گام سوراخ‌ها^۵ 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 همکاران^۶ [۸] می‌باشد. آن‌ها از شبیه‌سازی 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 در نظر گرفتن واکنش مورد بررسی قرار دادند و نتیجه گرفتند فرآیند سیالیت در هر دو نوع توزیع کننده گاز تقریباً مشابه است [۸].

زو و همکاران^۷ [۹] 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 گلدات 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 در نتیجه کیفیت سیالیت بالاتر است [۹].

در پژوهشی دیگر، سان و همکاران^۸ [۱۰] نشان دادند که شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی بر پایه تئوری جنبشی جریان گرانیولی توانایی توضیح ویژگی‌های دینامیکی راکتور بستر سیال گاز - جامد را دارند. آن‌ها از ذرات پلی اتیلن سبک خطی و همچنین شبیه‌سازی دو بعدی استفاده کرده و با استفاده از نوسانات فشاری مدل توسعه داده‌ی خود را راستی آزمایی کردند. آن‌ها همچنین برای دستیابی به مناسب‌ترین معادله‌ی ضریب درگ، از مقایسه‌ی الگوی فشار در جهت محوری راکتور با نتایج آزمایشگاهی استفاده کردند و نتیجه گرفتند ضریب درگ سیاملال و اوبراین^۹ توانایی پیش بینی رفتار هیدرودینامیکی بستر را دارد [۱۰].

⁴ Jang et al.

⁵ Pitch

⁶ Chen et al.

⁷ Zu et al.

⁸ Sun et al.

⁹ Syamlal O'Brien

در پژوهشی دیگر [۱۱]، رفتار هیدرودینامیکی یک راکتور بستر سیال دو بعدی توسط دینامیک سیالات محاسباتی و نرم افزار فلونت مورد بررسی قرار گرفت. این پژوهشگران نیز از مدل اولری - اولری همراه با تئوری جنبشی جریان گرانبولی 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 تقریباً ثابت می‌شود [۱۱].

با بررسی مطالعات صورت گرفته در زمینه‌ی 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. برای این کار از ابزار دینامیک سیالات محاسباتی استفاده شده است. برای مقایسه‌ی هیدرودینامیکی ابتدا یک مدل مناسب توسعه داده می‌شود. سپس مدل اعتباربخشی می‌شود و در نهایت با استفاده از مدل هیدرودینامیکی توسعه داده شده مقایسه‌ی هیدرودینامیکی دو راکتور صورت می‌پذیرد.

۲- مدل سازی 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 در نظر 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]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{u}_s) = 0 \quad (2)$$

$$\varepsilon_s + \varepsilon_g = 1 \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = \nabla \cdot \overline{\tau}_g - \varepsilon_g \nabla P + \beta(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s \mathbf{u}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = \nabla \cdot \overline{\tau}_s - \varepsilon_s \nabla P - \nabla P_s - \beta(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) + \varepsilon_s \rho_s \mathbf{g} \quad (5)$$

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_g سرعت فاز گاز، u_s سرعت فاز جامد، ε_g کسر حجمی فاز گاز، ε_s کسر حجمی فاز جامد، τ_g تنش فاز گاز و τ_s تنش فاز جامد می باشد. در جریان های دو فازی گاز - جامد، دو فاز در قالب نیروی درگ با یکدیگر برهمکنش دارند که این نیرو از پارامترهای بسیار مهم و تاثیر گذار در مدلسازی این نوع سیستم ها می باشد. در این پژوهش از مدل سیاملال و اوبراین [۱۳] استفاده شده است که برای سیستم های گاز-جامد توصیه می شود.

برای شبیه سازی همزن مورد استفاده در راکتور میتسوئی نیز از روش قاب مرجع متحرک^{۱۰} استفاده شده است. در این روش، ناحیه محاسباتی به یک ناحیه دوار (محدوده همزن) و یک ناحیه ثابت (ناحیه خارج از همزن) تقسیم می شود. در ناحیه ثابت معادلات بقا به صورت معمول حل می شوند و در قاب چرخان معادلات بقا مومنتوم با در نظر گرفتن نیروهای اضافی که حاصل از چرخش است حل می شوند.

در کنار معادلات اصلی بقای جرم و مومنتوم، معادلات دیگری نیز وجود دارند که برهمکنش بین ذرات جامد - جامد، جامد و جامد - دیواره را مشخص می کنند [۱۴]. در شبیه سازی اولری که در آن فاز جامد به صورت پیوسته در نظر گرفته می شود، به یک مدل مناسب برای پیش بینی رفتار رئولوژیک^{۱۱} فاز جامد نیاز است تا بتوان به وسیله آن رفتار رئولوژیک ذرات جامد که به مانند سیال در نظر گرفته شده اند را پیش بینی کرد. در این پژوهش از تئوری جنبشی جریان گرانولار^{۱۲} برای بیان برهمکنش های مذکور استفاده شده است. معادله بقا دمای گرانولی برای فاز جامد به صورت زیر نوشته می شود:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s \theta)}{\partial t} + \nabla(\varepsilon_s \rho_s \theta u_s) \right] = (-\nabla P_s \mathbf{I}_s + \tau_s) : \nabla u_s + \nabla(\kappa_s \nabla \theta) - \gamma_s + \varphi_\theta \quad (6)$$

در این معادله، سمت چپ تغییرات خالص انرژی جنبشی، اولین عبارت سمت راست معادله بیانگر مقدار انرژی تولید شده توسط تنسور تنش جامد می باشد که این انرژی ناشی از تجمع موضعی ذرات است که باعث تولید فشار جامد و تنسور تنشی می شود. عبارت دوم بیانگر مقدار نفوذ انرژی است که بر اساس گرادیان دمای گرانولی تعریف می شود و برابر حاصلضرب ضریب نفوذ دمای گرانولی در گرادیان دمای گرانولی می باشد، 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 می دهند که میزان از بین رفتن انرژی گرانولی به دلیل اصطکاک بین ذرات و گاز را محاسبه می کند [۱۵]. زیر مدل های مورد استفاده برای تخمین عبارت های موجود معادله های (۴) تا (۶) در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: معادلات تجربی استفاده شده در مدل هیدرودینامیکی

Table1: Empirical equations used in the hydrodynamic model

گیداسپو [۱۵]	مدل ویسکوزیته
گیداسپو [۱۵]	مدل کانداکتیویته
لون [۱۴]	مدل فشار گرانولی
جوهانسون جکسون شافر [۱۶]	مدل تنش اصطکاکی
سینسر جکسون [۱۷]	تابع توزیع شعاعی

¹⁰ Moving Reference Frame

¹¹ Rheological behavior

¹² KTGF: Kinetic theory of granular flow

سیاملال اوبراین [۱۳]

مدل درگ

ضرایب مدل جوهانسون جکسون شافر

۰/۰۵

فروود

۲

پارامتر n

۵

پارامتر P

۳۰

پارامتر Φ

۰/۰۵

پارامتر $\varepsilon_s > \varepsilon_{s,min}$

هنگامی که کسر حجمی جامد بالا است، تماس طولانی بین ذرات جامد برقرار می‌شود و همین موضوع سبب افزایش تنش بین ذرات جامد به واسطه افزایش اصطکاک می‌شود. تنش اصطکاکی که از برخورد مداوم ذرات نتیجه می‌شود، شامل دو پارامتر مهم ویسکوزیته برشی اصطکاکی^{۱۳} و فشار اصطکاکی^{۱۴} جامد است که به ترتیب در محاسبه نیروهای مماسی و عمودی اصطکاکی به کار می‌رود [۱۶].

$$\bar{\tau}_{s,f} = P_{s,f} + \mu_{s,f} (\nabla u_s + (\nabla u_s)^T) \quad (7)$$

تنش اصطکاکی به تنش محاسبه شده از تئوری جنبشی برای $\varepsilon_s > \varepsilon_{s,min}$ اضافه می‌شود [۱۶]:

$$P_s = P_{kinetic} + P_{s,f} \quad (8)$$

$$\mu_s = \mu_{kinetic} + \mu_{s,f} \quad (9)$$

مدل‌های متفاوتی برای محاسبه ویسکوزیته تنش برشی جامد $\mu_{s,f}$ 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 محاسبه فشار جامد استفاده شده است. این مدل‌ها نتایج بهتری نسبت به سایر مدل‌ها برای ذرات گلدارت B (مشابه ذرات این پژوهش) ایجاد کرده‌اند [۶].

۲-۲- شرایط مرزی و اولیه

در تمام شبیه‌سازی‌های انجام گرفته شبیه‌سازی 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 کسر حجمی برابر با ۰/۴۴). فشار اولیه برابر با فشار عملیاتی راکتور/بستر در نظر گرفته شد. برای تمام شبیه‌سازی‌ها برای سرعت فاز گاز، در ورودی شرط سرعت ثابت برای گاز (مقدار سرعت بر اساس شرایط شبیه‌سازی 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 یافته‌گی در نظر گرفته شد. برای کسر حجمی نیز، گرادیان صفر بر روی دیوار، ورودی و خروجی در نظر گرفته شد.

¹³ Frictional Shear Viscosity

¹⁴ Frictional Solid Pressure

۲-۳-۲- مراحل شبیه سازی ها

به منظور شبیه سازی راکتورهای صنعتی دو تکنولوژی بازل و میتسوئی 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 هزینه‌ی محاسباتی 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 اصلی و نیاز به تعداد سلول زیاد، از یک راکتور با قطر و ارتفاع کمتر استفاده شده است. بخشی و همکاران [۲۰] نشان دادند که با در نظر گرفتن حداقل ۵۰۰ میلی‌متر برای قطر راکتور می‌توان تصویر درستی از هیدرودینامیک راکتور صنعتی داشت چرا که از این اندازه به بالا تغییرات هیدرودینامیک وابسته به قطر نخواهد بود. بنابراین در این پژوهش از راکتوری کوچک‌تر که دارای قطر ۵۱۰ میلی‌متر و ارتفاع ۲۵۰۰ میلی‌متر می‌باشد و همچنین ارتفاع اولیه ذرات جامد در آن ۵۰۰ میلی‌متر است استفاده شد و عملیات استقلال از شبکه صورت گرفت. لازم به ذکر است که خواص ذرات جامد و گاز و همچنین سرعت گاز ورودی مطابق با سیستم اصلی انتخاب شدند.

۲-۳-۲- شبیه سازی‌های 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 B و همچنین رژیم جریان‌ی حبابی می‌باشد، نیاز است که داده‌های آزمایشگاهی مستخرج نیز در شرایط مشابه‌ای قرار داشته باشند و با علم بر این موضوع پژوهش انجام گرفته توسط باسیگلیو و همکاران [۲۱] انتخاب شده است. در این راستای آزمایشی، هندسه‌ی سیستم مورد بررسی همانند هندسه‌ی پژوهش انجام گرفته توسط باسیگلیو و همکاران [۲۱] انتخاب شد. اطلاعات مورد نیاز مستخرج از پژوهش مذکور به منظور توسعه مدل هیدرودینامیکی حاکم بر سیستم در جدول ۲ آورده شده‌اند. لازم به ذکر است که اندازه سلول‌ها با توجه به نتایجی که از مرحله استقلال از شبکه بدست آمد، انتخاب شد.

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

Table 2: Geometry and specification of the fluidized bed reactor used for hydrodynamic model validation [21]

مقدار	متغیر	مقدار	متغیر
۲۵۰	قطر ذرات (micron)	۸۰۰	ارتفاع بستر (mm)
۲۵۰۰	دانشیه ذرات (kg/m^3)	۱۸۰	عرض بستر (mm)
۵/۲۴	حداقل سرعت سیالیت (cm/s)	۱۵	عمق بستر (mm)
هوا	گاز (-)	۳۶۰	ارتفاع اولیه بستر (mm)
		۰/۳۵	کسر اولیه فاز گاز (-)

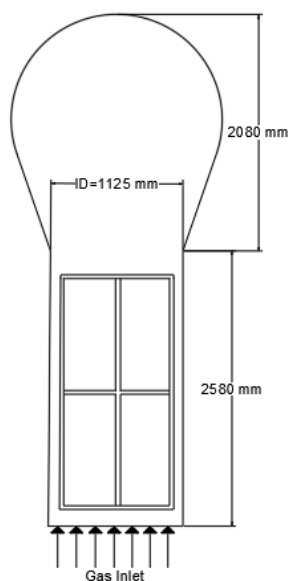
اندازه گیری قطر حباب:

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 ۰/۸ 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.

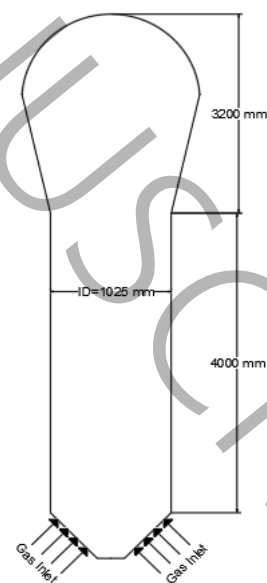
۳-۲-۳- مقایسه هیدرودینامیکی راکتورها در مقیاس صنعتی

برای شبیه سازی‌های راکتورهای صنعتی، در گام نخست، برای ترسیم هندسه‌ی راکتورهای صنعتی از نرم افزار سالیدورک ۲۰۱۵ و نقشه‌های صنعتی^{۱۵} 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 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 سازی‌ها در جدول ۳ آورده شده‌اند.

(ب)



(الف)



شکل ۱: هندسه‌ی راکتورهای مورد استفاده برای مقایسه هیدرودینامیکی راکتور مورد استفاده در (الف) تکنولوژی بازل (ب) تکنولوژی میتسوئی

Figure 1: The geometry of the reactors used for the hydrodynamic comparison of the reactor used in a) Basell technology b) Mitsui technology

جدول ۳: مشخصات راکتورهای صنعتی شبیه سازی شده

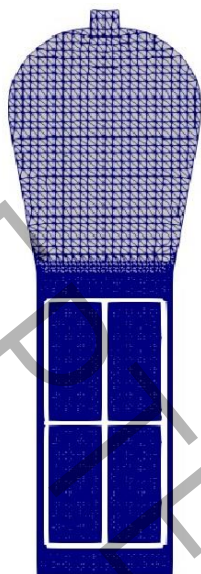
Table 3: Specification of simulated industrial reactors

میتسوئی	بازل	متغیر	میتسوئی	بازل	متغیر
۴۰/۶۸	۴۰/۶۸	وزن مولکولی گاز (gr/mol)	۱۱۲۵	۱۰۲۵	قطر بستر (mm)
۳۰	۳۰	مدت شبیه سازی (s)	۴۶۶۰	۷۴۵۵	ارتفاع کلی بستر (mm)
۳۰-۱۰	۳۰-۱۰	میانگین گیری (s)	۰/۵۶	۰/۵۶	کسر اولیه فاز گاز (-)
۲	NA	سرعت همزن (rpm)	۱۶۸۵	۱۶۸۵	قطر ذرات (micron)
۲۴	۲۴	فشار عملیاتی (Barg)	۹۱۸	۹۱۸	دانسیته ذرات (kg/m ³)
۸۰	۸۰	دمای عملیاتی (°C)	۰/۶۱	۰/۶۱	سرعت گاز ورودی (m/s)
۰/۹	۰/۹	ضریب برخورد (-)	۰/۰۰۰۰۱۱۸۵	۰/۰۰۰۰۱۱۸۵	ویسکوزیته گاز (Pa.s)

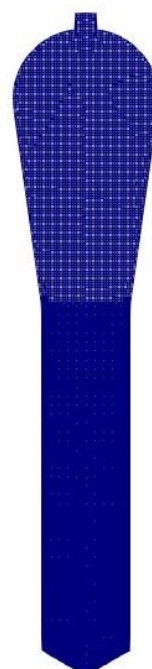
برای شبکه بندی راکتور از ابزار موجود در نرم افزار اوپن فوم^{۱۶} استفاده شد. اندازه سلول‌ها بر اساس نتایج حاصل از استقلال از شبکه انتخاب شد. شبکه تولید شده برای دو راکتور صنعتی مطابق شکل ۲ می‌باشد. در منطقه باز شده بالای راکتور که فقط فاز گاز وجود دارد، سلول‌های ریز مورد نیاز نیست، بنابراین در این ناحیه از سلول‌های درشت‌تری استفاده شد. در تولید این شبکه، از شبکه پس زمینه کاملاً 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 می‌شود تاثیر بسیار زیادی دارد. شبکه حاصل برای راکتور تکنولوژی بازل شامل تقریباً ششصد و سی هزار سلول و برای راکتور تکنولوژی میتسوئی شامل تقریباً هشتصد و شصت هزار سلول بود.

¹⁶ OpenFOAM

(ب)



(الف)



شکل ۲: برشی از شبکه تولید شده برای دو راکتور صنعتی شبیه سازی شده: (الف) تکنولوژی بازل (ب) تکنولوژی میتسوئی

Figure 2: A section of the generated mesh for two simulated industrial reactors: (a) Basell technology (b) Mitsui technology

۲-۴- نرم افزار و سخت افزار مورد استفاده

برای شبیه سازی هیدرودینامیکی از نرم افزار متن باز اوپن فوم نسخه ۹ استفاده شده است. همچنین از حلگر *multiphaseEulerFoam* استفاده شده است. کامپیوتر مورد استفاده مجهز به پردازنده مرکزی *AMD threadripper ۳۹۶۰X* با ۲۴ هسته و حافظه ۶۴ گیگابایتی بود. این شبیه سازی ها در سیستم عامل *Ubuntu ۲۰,۴* انجام گرفتند.

با توجه به حجم بالای راکتورهای صنعتی و همچنین تعداد بالای سلول های موجود در هر راکتور، شبیه سازی یک ثانیه از راکتورهای میتسوئی 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 میتسوئی و بازل با استفاده از سخت افزار مورد استفاده به ترتیب نزدیک به ۷ و ۵ روز زمان احتیاج بود.

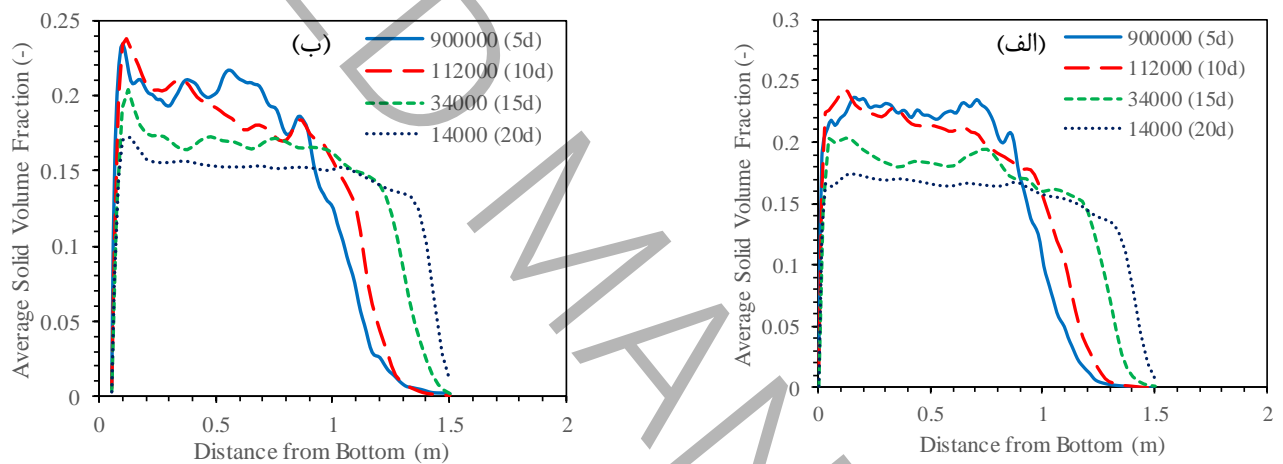
۳- نتایج و بحث

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 میتسوئی 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 ۹۰۰,۰۰۰، 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.



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: ۹۱۸ kg/m³، سرعت گاز ورودی: ۰/۶۱ m/s، ویسکوزیته گاز ورودی: ۱/۱۸۵ × ۱۰^{-۵} Pa.s)

Figure 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)

پس از بررسی مشاهده شد با کاهش اندازه سلول‌های شبکه از ۱۰d به ۵d تغییر قابل توجهی در میانگین زمانی کسر حجمی ذرات جامد به وجود نمی‌آید و تنها حجم محاسبات به‌طور چشمگیری افزایش پیدا می‌کند. این افزایش چشمگیر هزینه‌ی محاسباتی در شبیه‌سازی‌های اصلی که به مراتب از راکتورهای بزرگ‌تری استفاده می‌شود بیشتر نمایان می‌شود. بنابراین براساس بررسی‌های انجام شده نتیجه می‌شود اندازه ۱۰d مناسب‌ترین اندازه برای سیستم موردنظر می‌باشد.

یکی دیگر از روش‌های مطالعه کیفیت شبکه استفاده از شاخص همگرایی شبکه^{۱۷} است [۲۲]. این شاخص سنجش‌های برای تعیین دوری مقدار محاسبه شده در شبیه‌سازی از مقدار عددی تقریبی است. این شاخص نشان می‌دهد که اگر کوچک شدن شبکه مرحله‌ای اضافه شود جواب چه مقدار تغییر می‌کند. 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 شبیه‌سازی قرار گرفت. ارتفاع باز شده 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 حفاصل 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 می‌شود 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 کمتری از مراحل قبل. بنابراین طبق بحثی که در بالا شد، هرچند کاهش اندازه سلول‌ها از سطح ۲ به سطح ۱ (از ۱۰ برابر به ۵ برابر قطر ذره) تغییر می‌کند، اما این تغییر به نسبت خیلی زیاد نیست و می‌توان با تحمل کمی خطا شبیه‌سازی‌های سریع‌تری انجام داد.

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

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

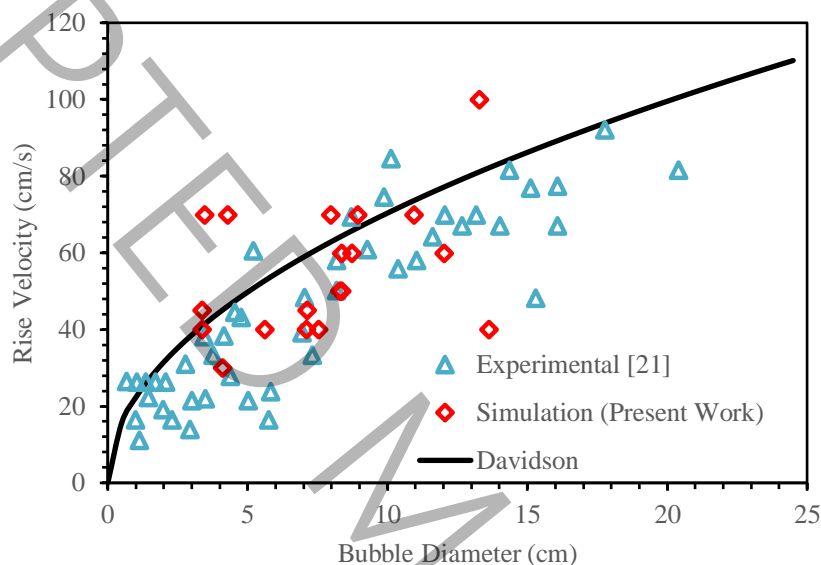
سطح مش	اندازه مش	ارتفاع بستر (متر) در مرکز راکتور	ارتفاع بستر (متر) در وسط حد واصل مرکز و دیوار راکتور	درصد شاخص همگرایی سطح ۱ به ۲	مرکز راکتور	وسط حد واصل مرکز و دیوار راکتور
۱	۵ برابر قطر ذرات	۱/۱۲۸	۱/۱	درصد شاخص همگرایی سطح ۱ به ۲	۳/۸۸	۴/۵۵
۲	۱۰ برابر قطر ذرات	۱/۱۸۶	۱/۱۶	درصد شاخص همگرایی سطح ۲ به ۳	۲۱/۰۷	۲۲/۷۹
۳	۱۵ برابر قطر ذرات	۱/۳۴	۱/۳۱	شاخص همگرایی سطح ۳ به ۴	۲۴/۲۷	۲۴/۷۵
۴	۲۰ برابر قطر ذرات	۱/۴۷	۱/۴۳			

۲-۳- راستی آزمایشی 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 بالا رفتن حباب‌ها با قطرهای متفاوت با داده‌های آزمایشگاهی [21] و همچنین یکی از رابطه‌های تجربی داویدسون و هریسون [۲۴] مقایسه شده است.

$$u_b = 0.711 \sqrt{g d_p} \quad (10)$$

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



شکل ۴: مقایسه‌ی توزیع سرعت بالا رفتن حباب‌ها با قطر متغیر حاصل از شبیه‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی [۲۱] و رابطه‌ی 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: 2500 kg/m^3 ، حداقل سرعت سیالیت: $5/24 \text{ cm/s}$ ، گاز ورودی: هوا

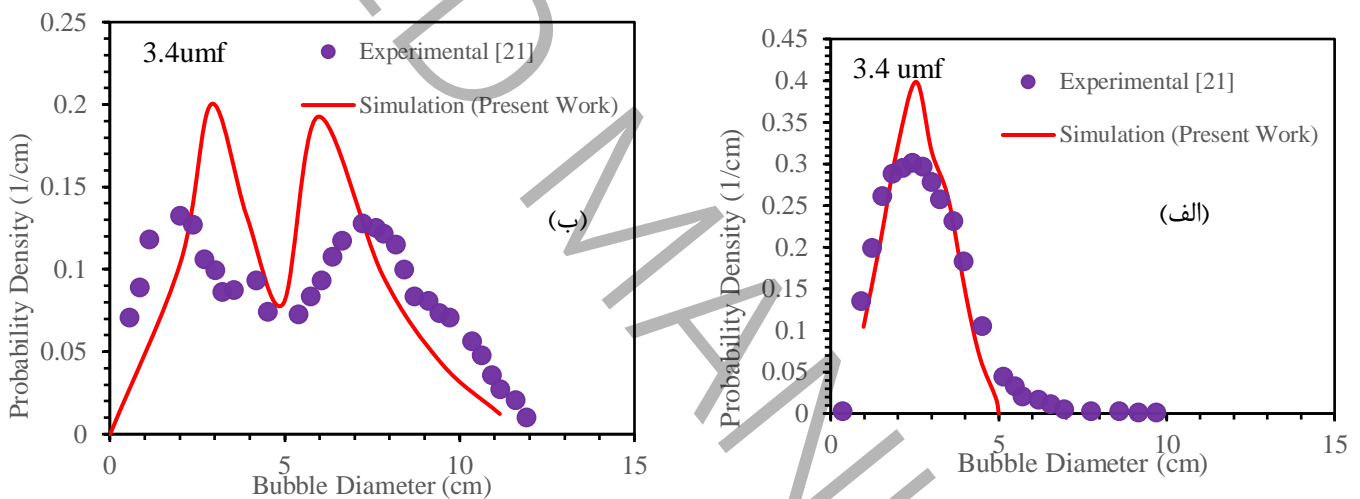
Figure 4: Comparison of the distribution of rising velocity of bubbles with variable diameter from simulation and experimental data [21] and Davidson and Harrison correlation [22]: Reactor height: 800 mm, reactor width: 180 mm, initial bed height: 360 mm, solid particle diameter: 250 microns, solid particle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

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 قبلاً (در شکل ۴) بررسی شد نیز نقش مهمی در کیفیت اختلاط در فاز جامد ایفا می‌کنند. این موضوع قبلاً توسط نوروزی و همکاران [۲۵] نشان داده شده است. در دنباله حباب‌ها جریانی از جامد ایجاد می‌شود 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 $3/4$ و 5 برابر سرعت حداقل سیالیت با داده‌های آزمایشگاهی [۲۱] مقایسه می‌شوند.

شکل ۵ توزیع اندازه حباب‌ها را در سرعت $3/4$ برابر حداقل سیالیت نشان می‌دهد. مطابق با شکل ۵ (الف) که مربوط به ارتفاع ۹۰ میلیمتری است، داده‌های مستخرج از شبیه‌سازی و همچنین داده‌های آزمایشگاهی بسیار نزدیک بوده و در هر دو آن‌ها حباب‌های با

قطر تقریباً ۳ سانتی متری بیشترین سهم از حباب‌های موجود را به خود اختصاص داده‌اند. در این شکل مشاهده می‌شود با توجه به اینکه در ارتفاع نسبتاً 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 ۰/۷۵ 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 به طوری که حباب‌های با قطر ۲ و ۷/۵ 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.

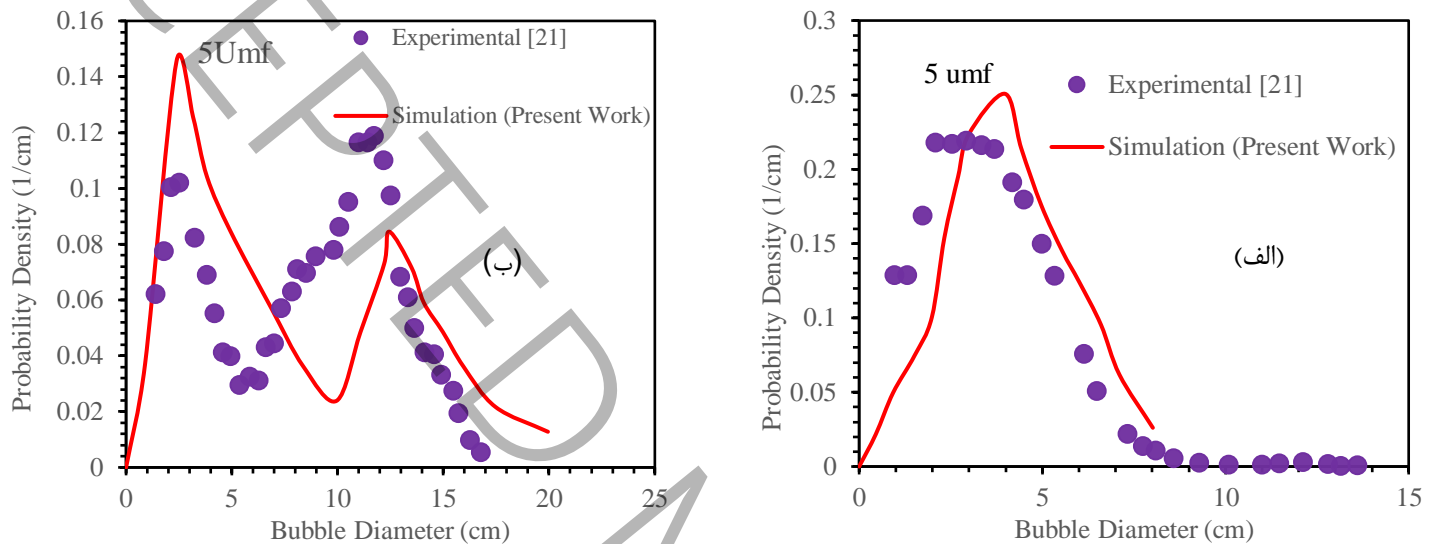


شکل ۵: مقایسه‌ی توزیع اندازه حباب‌ها در ارتفاع (الف) ۹۰ و (ب) ۲۷۰ میلیمتری از کف بستر و سرعت ۳/۴ برابر حداقل سرعت سیالیت بین داده‌های شبیه سازی و آزمایشگاهی: ارتفاع راکتور: ۸۰۰ میلیمتر، عرض راکتور: ۱۸۰ میلیمتر، ارتفاع اولیه بستر: ۳۶۰ میلیمتر، قطر ذرات جامد: ۲۵۰ میکرون، دانسیته ذرات جامد: 2500 kg/m^3 ، حداقل سرعت سیالیت: 5.24 cm/s ، گاز ورودی: هوا. میانگین خطای نسبی شکل الف: ۷ درصد و شکل ب: ۳۸ درصد

Figure 5: 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 3.4 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/m^3 , minimum fluidization velocity: 5.24 cm/s , inlet gas: air. Average relative error of Figure A: 7% and Figure B: 38%

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 ۰/۲۵ برابر ارتفاع اولیه بستر نیز به مانند شکل 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 $3/4$ برابر حداقل سرعت سیالیت بیشتر حباب‌ها دارای قطر $2/5$ الی 3 سانتی متری و در سرعت 5 برابر حداقل سرعت سیالیت بیشتر حباب‌ها دارای قطر $3/5$ الی 4 سانتی متری می‌باشند. توزیع اندازه حباب‌ها در ارتفاع 270 میلیمتری نیز برای سرعت 5 برابر حداقل سرعت سیالیت در شکل ۶ (ب) آورده شده است. همانند شکل ۵ (ب) مربوط به ارتفاع 270 میلیمتری در سرعت $3/4$ برابر حداقل سرعت سیالیت، در نمودارهای مربوط به سرعت 5 برابر حداقل سرعت سیالیت نیز با افزایش ارتفاع حباب‌های بزرگ‌تری مشاهده می‌شود.



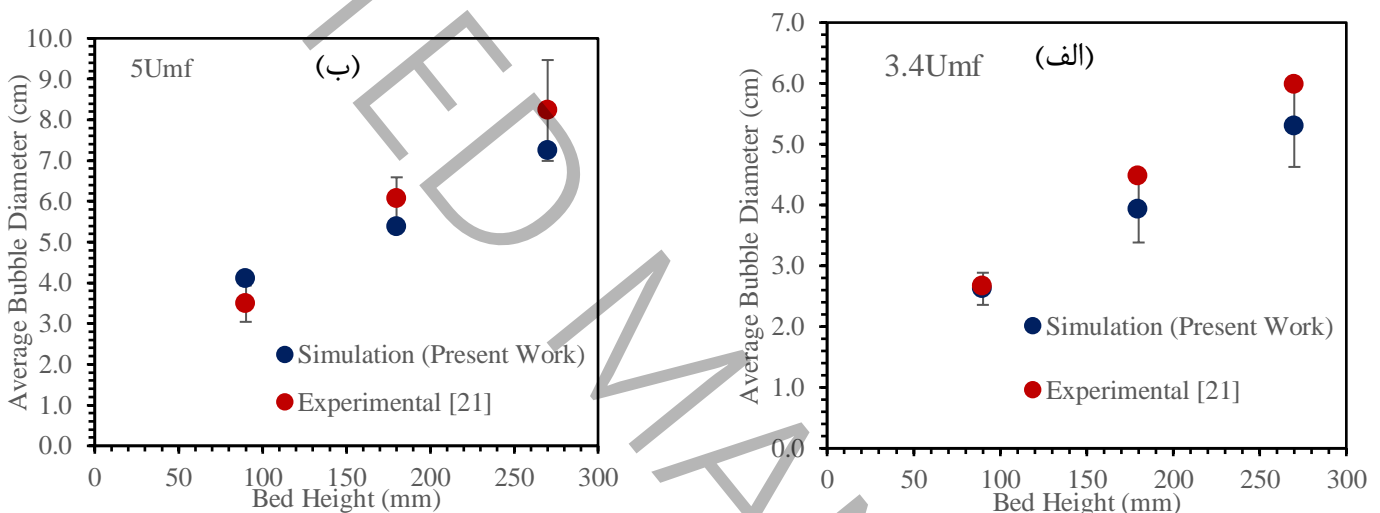
(ب) 270 میلیمتری از کف بستر و سرعت 5 برابر حداقل سرعت سیالیت بین داده (الف) 90 و (شکل ۶- مقایسه‌ی توزیع اندازه حباب‌ها در ارتفاع های شبیه سازی و آزمایشگاهی: ارتفاع راکتور: 800 میلیمتر، عرض راکتور: 180 میلیمتر، ارتفاع اولیه بستر: 360 میلیمتر، قطر ذرات جامد: 250 میکرون، گاز ورودی: هوا. میانگین خطای نسبی شکل الف: 21 درصد، 2500 kg/m^3 ، حداقل سرعت سیالیت: 5.24 cm/s ، دانسیته ذرات جامد: 2500 kg/m^3 و شکل ب: 45 درصد

Figure 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 Figure A: 21% and Figure B: 45%

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 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 می‌شود [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 ذرات بعنوان یک فاز پیوسته و استفاده از نظریه جنبشی جریان گرانولار به همراه مدل اصطکاکی ارتباط داد. پژوهش‌های متعددی وجود دارند که نشان می‌دهند نوع مدل‌های بکارگرفته شده و تئوری جنبشی جریان گرانولار برای فاز جامد با وجود اینکه در دسته کامل‌ترین مدل‌های موجود

در زمینه پیش بینی خواص فاز جامد قرار می‌گیرد، اما همچنان دارای کاستی‌هایی است که باعث می‌شود که نتایج شبیه سازی دچار خطا شود [۲۷، ۲۸].

بنابراین و با بررسی داده‌های شبیه سازی مشاهده شد اختلافاتی بین توزیع اندازه‌ی حباب‌های داده‌های حاصل از شبیه سازی و داده‌های 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.



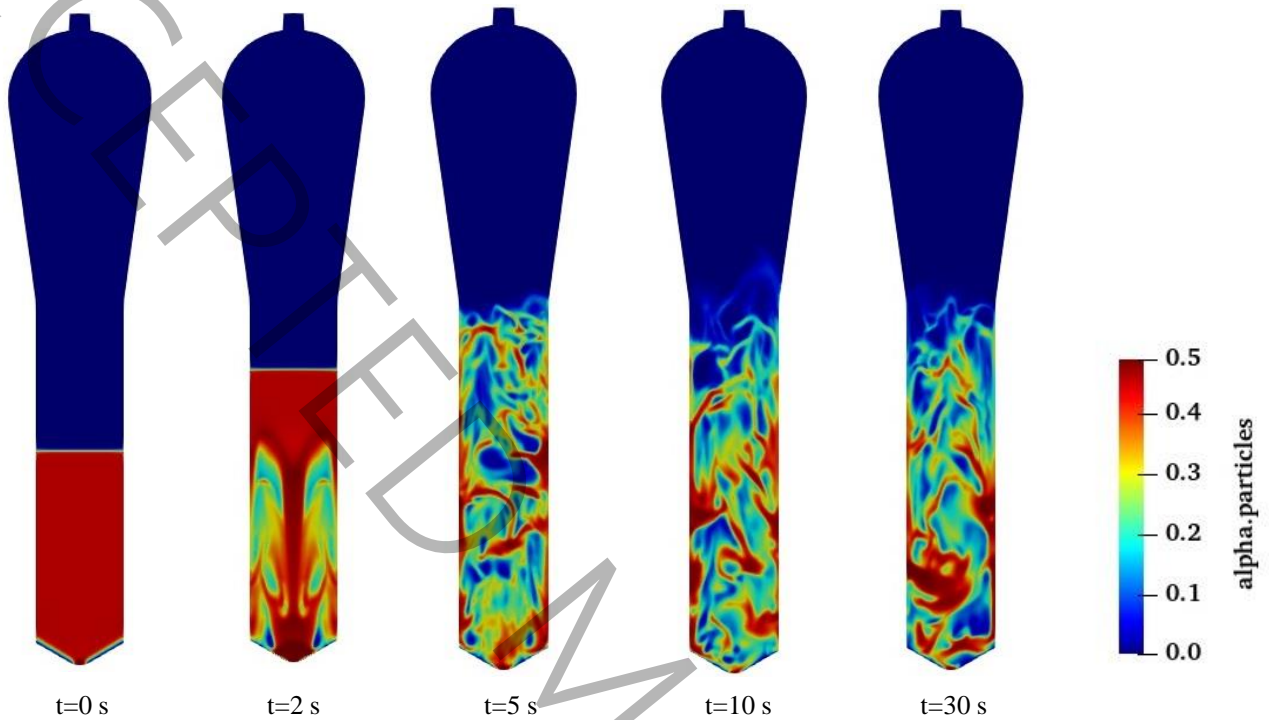
شکل ۷- میانگین قطر حباب‌ها در ارتفاعات ۹۰، ۱۸۰ و ۲۷۰ میلیمتری از کف بستر و سرعت (الف) ۳/۴ و (ب) ۵ برابر حداقل سرعت سیالیت بین داده‌های شبیه سازی و آزمایشگاهی [۲۱]: ارتفاع راکتور: ۸۰۰ میلیمتر، عرض راکتور: ۱۸۰ میلیمتر، ارتفاع اولیه بستر: ۳۶۰ میلیمتر، قطر ذرات جامد: ۲۵۰ میکرون، دانسیته ذرات جامد: 2500 kg/m^3 ، حداقل سرعت سیالیت: 5.24 cm/s ، گاز ورودی: هوا

Figure 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/m^3 , minimum fluidization velocity: 5.24 cm/s , inlet gas: air

۳-۳- مقایسه هیدرودینامیکی دو تکنولوژی مختلف

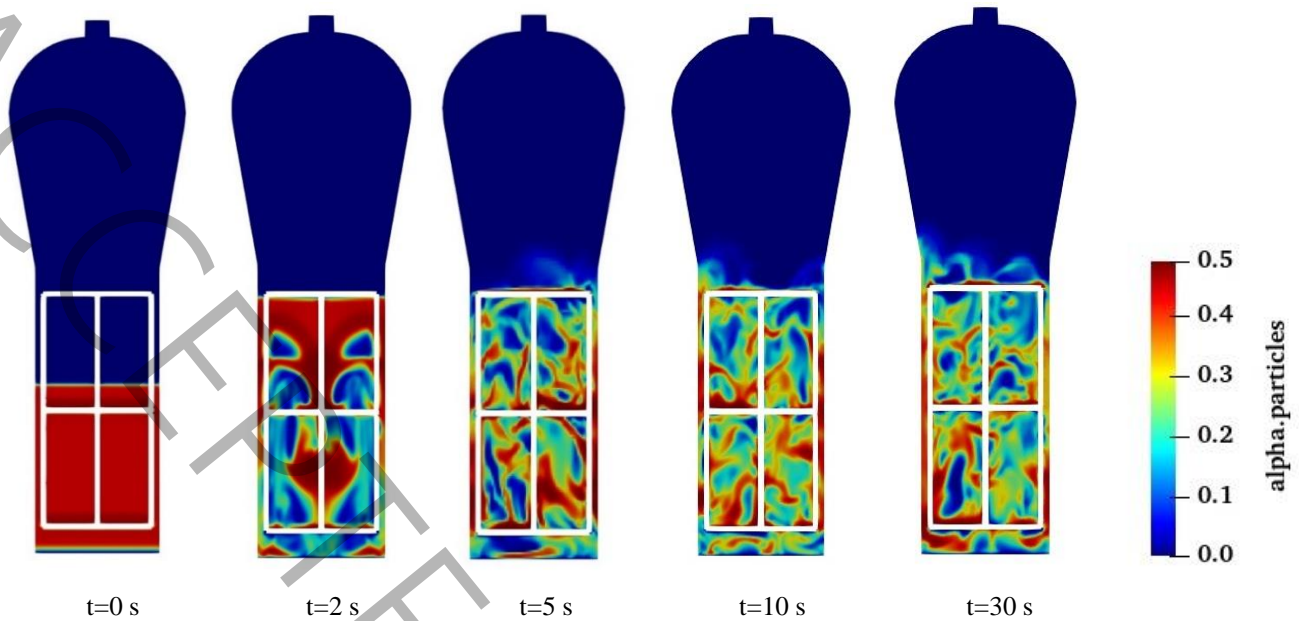
هر دو راکتور به صورت ۳ بعدی و مطابق با توضیحات آورده شده در بخش مدل‌سازی و شبیه سازی، شبیه سازی شده و میدان‌های خروجی از نرم افزار شبیه ساز نیز که نشان دهنده‌ی کسر حجمی ذرات جامد در زمان‌های مختلف می‌باشند در شکل‌های ۸ و ۹ آورده شده است. مطابق با شکل ۸ که مربوط به میدان‌های کسر حجمی ذرات جامد در زمان‌های 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 میتسوئی 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.



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: 918 kg/m^3 ، سرعت گاز ورودی: 0.61 m/s ، ویسکوزیته گاز ورودی: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ ، جرم مولکولی گاز ورودی: 40.68 gr/mol

Figure 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: 1.85×10^{-5} Pa.s, inlet gas molecular weight: 40.68 gr/mol

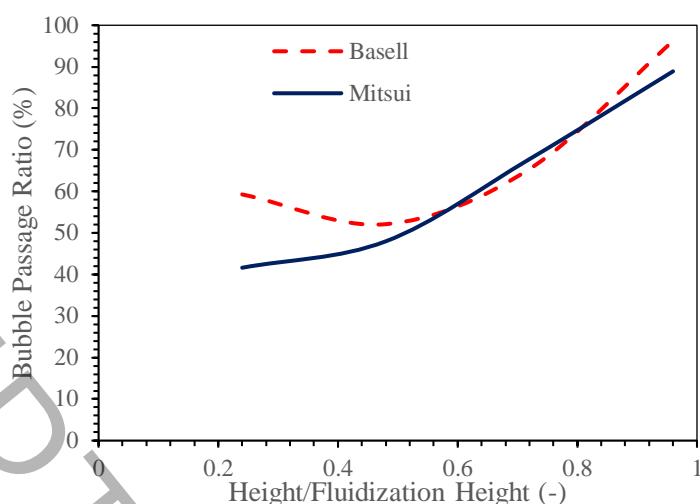


شکل ۹- میدان‌های کسر حجمی ذرات جامد حاصل از شبیه سازی راکتور صنعتی مورد استفاده در تکنولوژی میتسوئی در زمان‌های مختلف. قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: 918 kg/m^3 ، سرعت گاز ورودی: 0.61 m/s ، ویسکوزیته گاز ورودی: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ ، جرم مولکولی گاز ورودی: 40.68 gr/mol

Figure 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: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$, inlet gas molecular weight: 40.68 gr/mol

قبل از مقایسه هیدرودینامیکی دو راکتور الگوی جریان‌های فاز گاز مورد مطالعه قرار گرفت. به منظور بررسی الگوی جریان‌های گاز از نسبت دبی حجمی جریان‌های حبابی به مجموع دبی‌های حجمی جریان‌های حبابی و جریان‌های امولسیون استفاده شده است. در راکتورهای بستر سیال گاز-جامد، جریان‌های فاز گازی برای عبور از بستر یا از فاز امولسیون به سمت بالا حرکت می‌کند و یا از میان حباب‌های تشکیل شده. هنگامی که جریان‌های گاز از فاز امولسیون می‌گذرد با فاز جامد در تماس قرار می‌گیرد ولی هنگامی که از میان حباب‌ها می‌گذرد با کمترین تماس با فاز جامد و از طریق حباب‌های تشکیل شده به سمت بالا حرکت می‌کند. در این پژوهش و به منظور بررسی الگوی جریان‌های گاز از درصد جریان‌های گاز که از حباب‌های تشکیل شده عبور می‌کند^{۱۸} استفاده شده است. مطابق شکل ۱۰، درصد دبی حجمی جریان‌های حبابی در ارتفاعات نرمال مختلف در دو راکتور بازل و میتسوئی رسم شده است. ارتفاع نرمال نسبت فاصله از کف راکتور به ارتفاع منبسط شده بستر در حالت سیالیت می‌باشد.

¹⁸ Bubble Passage Ratio



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

Figure 10: Investigating the bubble passage ratio in Basell and Mitsui reactors

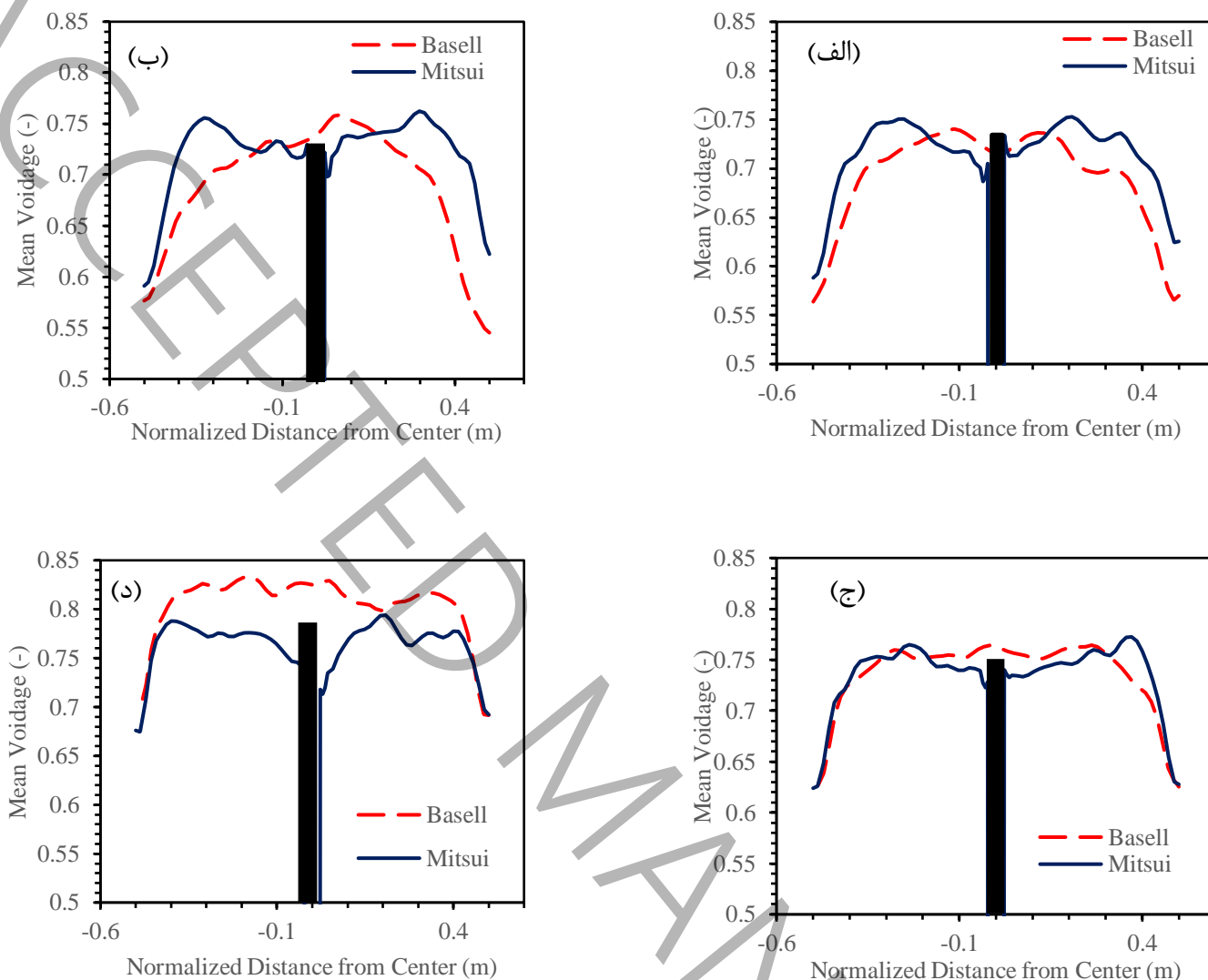
در هر دو شکل با افزایش ارتفاع، درصد جریان حبابی افزایش یافته است. این بدان معناست که جریان حبابی در پایین بستر که ذرات جامد بیشتری وجود دارد کمتر بوده و در این نواحی اکثراً فاز امولسیون وجود داشته و فاز گاز با عبور از آن با فاز جامد تماس برقرار می‌کند. اما رفته رفته و با افزایش ارتفاع جریان حبابی بیشتر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

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 می‌شود 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.

۱-۳-۳- 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 یکنواخت‌تر باشد، تماس بین فازها نیز با کیفیت بالاتری انجام می‌گیرد و در نتیجه‌ی آن شرایط انتقال جرم و حرارت یکنواخت‌تری 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 عمودی نیز میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز از زمان ۱۰ تا ۳۰ ثانیه را نشان می‌دهد. در این شکل‌ها همچنین محور مربوط به همزن مورد استفاده در راکتور میتسویی با یک مستطیل مشکی رنگ نمایش داده شده است.



شکل ۱۱- مقایسه‌ی 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 ارتفاع‌های نرمال مختلف (الف) ۰/۲۴، (ب) ۰/۴۸، (ج) ۰/۷۲، (د) ۰/۹۶ در قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: 918 kg/m^3 ، سرعت گاز ورودی: 0.61 m/s ، ویسکوزیته گاز ورودی: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ ، جرم مولکولی گاز ورودی: 40.68 gr/mol

Figure 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/m^3 , inlet gas velocity: 0.61 m/s , inlet gas viscosity: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$, inlet gas molecular weight: 40.68 gr/mol

مطابق با شکل ۱۱ (الف)، در ارتفاع نرمال ۰/۲۴ تفاوت چندانی بین توزیع گاز در دو راکتور مختلف دیده نمی‌شود و تنها راکتور میتسویی یکنواختی توزیع گاز کمی بهتر را از خود نشان می‌دهد. به منظور بررسی عددی و دقیق‌تر نیز می‌توان از مقایسه‌ی ضریب تغییر^{۱۹} که از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود استفاده کرد.

¹⁹ CoV: Coefficient of Variation

$$CoV = \frac{\text{Standard Deviation}}{\text{Average}} \times 100 \quad (11)$$

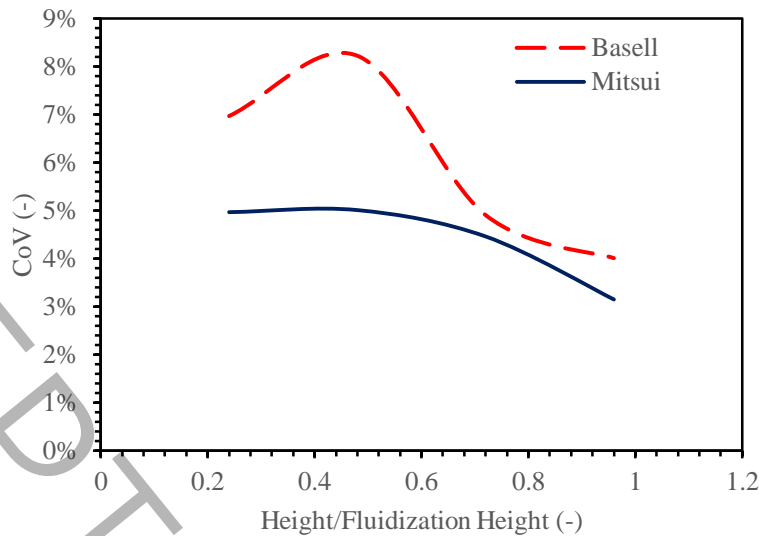
این پارامتر یکنواختی یک توزیع را نشان می‌دهد. هرچه این کمیت به عدد صفر درصد نزدیک‌تر باشد توزیع یکنواخت‌تر و هر چه به عدد ۱۰۰ درصد نزدیک‌تر باشد جریان غیر یکنواخت‌تر خواهد بود. پس از محاسبه‌ی ضریب تغییر در دو راکتور مختلف مشاهده شد که ضریب تغییر مربوط به دو راکتور بازل و میتسوئی در ارتفاع نرمال ۰/۲۴ (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 میتسوئی 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 میتسوئی یکنواخت‌تر می‌باشد. همانطور که در شکل نیز مشاهده می‌شود، کسر حجمی فاز گاز در راکتور تکنولوژی میتسوئی سریع‌تر به یکنواختی می‌رسد و در طول شعاع راکتور کیفیت تماس بهتری بین دو فاز اتفاق می‌افتد. همچنین با محاسبه‌ی ضریب تغییر نیز مشاهده شد که ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسوئی به ترتیب برابر ۵/۰ و ۸/۲ درصد می‌باشد که نسبت به ارتفاع قبلی تفاوت بیشتری را نشان می‌دهد.

در ارتفاع نرمال ۰/۷۲ 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 محاسبه‌ی ضریب تغییر نیز می‌توان یکنواختی هر دو راکتور را مشاهده کرد. پس از بررسی مشاهده شد، ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسوئی در این ارتفاع به ترتیب برابر ۴/۹ و ۴/۵ درصد می‌باشد که نسبت به دو ارتفاع قبلی اختلاف کمتری مشاهده می‌شود.

در نهایت و در ارتفاع نرمال ۰/۹۶ و مطابق شکل ۱۱ (د) نیز مشاهده می‌شود تماس دو فاز در راکتور تکنولوژی میتسوئی با اختلاف کمی از 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 میتسوئی 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 پایین‌تر از خود نشان می‌دهند.

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 در حالت 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 میتسوئی رفته رفته توزیع دو فاز یکنواخت‌تر شده و کیفیت تماس بین دو فاز بیشتر می‌شود. همچنین در راکتور تکنولوژی بازل نیز این روند تقریباً مشابه می‌باشد.



شکل ۱۲- مقایسه‌ی مقدار ضریب تغییر مربوط به میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز بر حسب ارتفاع نرمال راکتور و در دو راکتور مختلف (بازل و میتسوئی). قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: 918 kg/m^3 ، سرعت گاز ورودی: 0.61 m/s ، ویسکوزیته گاز ورودی: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ ، جرم مولکولی گاز ورودی: 40.68 gr/mol

Figure 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/m^3 , inlet gas velocity: 0.61 m/s , inlet gas viscosity: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$, inlet gas molecular weight: 40.68 gr/mol

همانطور که در شکل‌های ۱۱ و ۱۲ مشاهده شد، کیفیت تماس ذرات جامد و مونومر گازی در تکنولوژی میتسوئی 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 یکنواخت‌تری در قسمت‌های مختلف راکتور انجام خواهد گرفت و باعث کنترل پذیری بهتر فرآیند می‌شود. 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 می‌شود. همچنین در نقاطی که تراکم ذرات جامد کمتر است، به دلیل کاهش نسبت سطح تماس گاز-جامد نرخ پلیمر تولیدی کاهش پیدا می‌کند. در نتیجه سبب غیر یکنواختی انتقال انرژی و جرم در کل بستر می‌شود. بنابراین کیفیت تماس دو فاز از اهمیت بالایی برخوردار می‌باشد.

مطابق با بررسی‌های انجام گرفته بر روی میانگین زمانی کسر حجمی فاز گاز در محور شعاعی دو راکتور مورد استفاده در تکنولوژی‌های بازل و میتسوئی 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 میتسوئی به صورت یکنواخت‌تری با ذرات جامد در تماس است که این یکنواختی بیشتر باعث افزایش کیفیت تماس دو فاز گاز و جامد می‌شود.

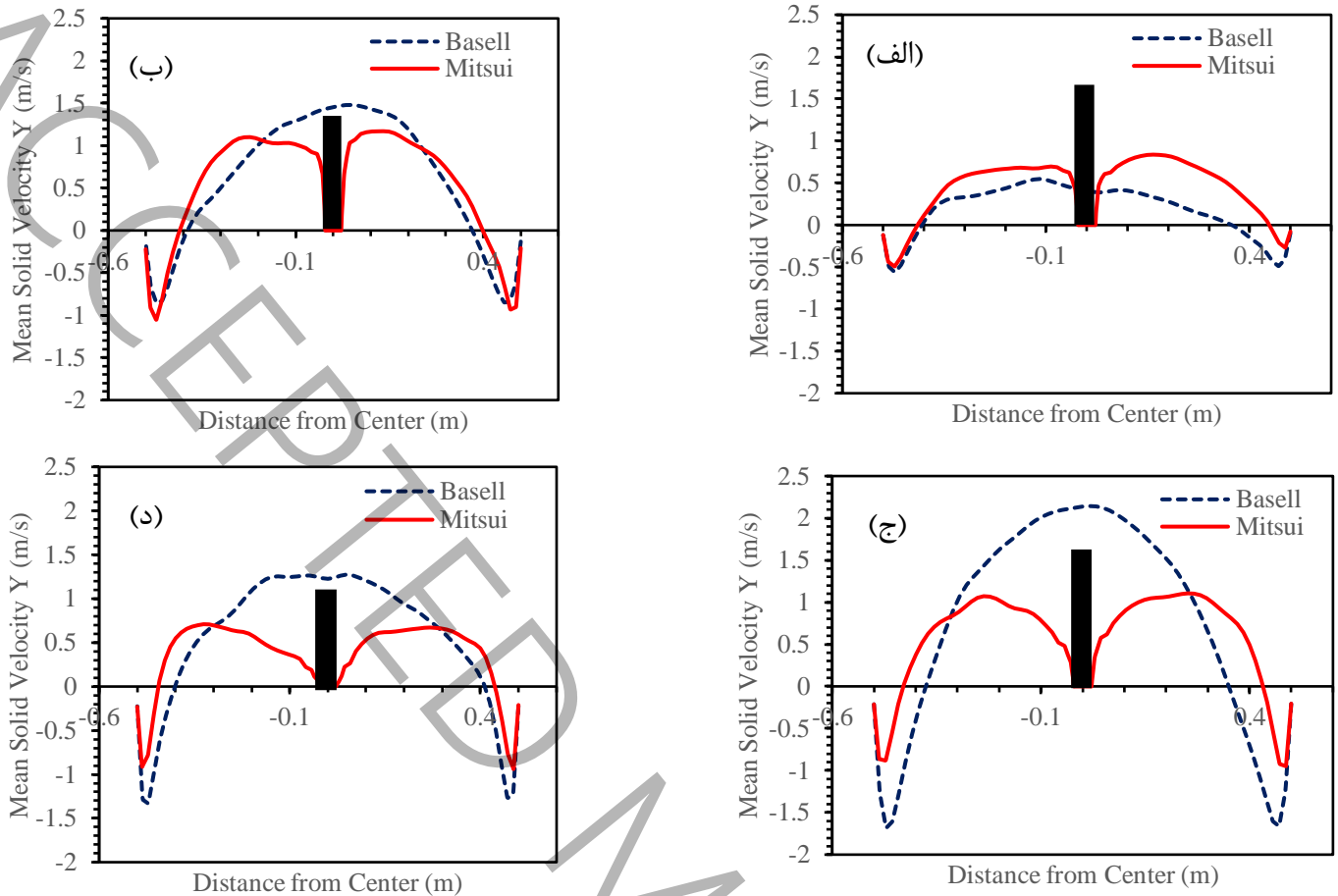
کیفیت حرکت ذرات جامد نیز یکی از پارامترهای بسیار مهم در هیدرودینامیک راکتورهای بستر سیال می‌باشد. می‌توان با بررسی سرعت میانگین ذرات جامد کیفیت حرکت آن‌ها را مورد بررسی قرار داد. در شکل ۱۳ میانگین زمانی سرعت حرکت ذرات جامد در جهت محوری و در ارتفاعات نرمال شده‌ی مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. در این 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)، (ج) و (د) به ترتیب در ارتفاعات نرمال ۰/۲۴، ۰/۴۸، ۰/۷۲ و ۰/۹۶ می‌باشند. همانطور که در شکل مشخص است نحوه‌ی حرکت ذرات جامد در دو راکتور تقریباً 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 می‌شود در ارتفاع نرمال ۰/۲۴ شدت حرکت ذرات جامد در راکتور میتسوئی با اختلاف بسیار کمی بیشتر از راکتور بازل می‌باشد اما با فاصله گرفتن از کف بستر و مطابق شکل ۱۳ در ارتفاعات نرمال ۰/۴۸ و ۰/۷۲ شدت حرکت ذرات جامد در راکتور تکنولوژی بازل بیشتر شده به طوری که در ارتفاع نرمال ۰/۷۲ (شکل ۱۳ ج)) بیشترین مقدار سرعت ذرات جامد تقریباً برابر ۲ متر بر ثانیه و دو برابر بیشتر از بیشترین سرعت ذرات جامد در تکنولوژی میتسوئی که تقریباً برابر ۱ متر بر ثانیه است، می‌باشد.

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 ارتفاع بستر را طی می‌کند. با توجه به اینکه در راکتورهای بستر سیال فاز گاز با حرکت خود ذرات جامد را با خود به سمت بالا می‌برد و سبب حرکت ذرات جامد می‌شود، بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که سرعت حرکت ذرات جامد در این راکتور بیشتر از راکتور میتسوئی می‌باشد که مطابق با نتایج حاصل از شبیه‌سازی 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 میتسوئی می‌باشد. بنابراین نتیجه می‌شود در راکتور تکنولوژی میتسوئی 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.



شکل ۱۳- مقایسه‌ی میانگین زمانی سرعت حرکت ذرات جامد (از زمان ۱۰ تا ۳۰ ثانیه) در جهت محوری در دو راکتور مختلف (بازل و میتسوئی) و در ارتفاع‌های نرمال مختلف (الف) ۰/۲۴، (ب) ۰/۴۸، (ج) ۰/۷۲، (د) ۰/۹۶ قطر ذرات جامد: ۱۶۸۵ میکرون، دانسیته ذرات جامد: 918 kg/m^3 ، سرعت گاز ورودی: 0.61 m/s ، ویسکوزیته گاز ورودی: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ ، جرم مولکولی گاز ورودی: 40.68 gr/mol

Figure 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/m^3 , inlet gas velocity: 0.61 m/s , inlet gas viscosity: $1.85 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$, inlet gas molecular weight: 40.68 gr/mol

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 میتسوئی پرداخته شد. در راکتور تکنولوژی میتسوئی 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 سائز سلول ۱۰ برابر قطر ذرات جامد، می‌توان با تقریب خوب و هزینه‌ی 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 میتسوئی در مقیاس صنعتی پرداخته شد. به منظور مقایسه‌ی 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 میتسوئی بهتر از راکتور تکنولوژی بازل بوده و در نتیجه کیفیت تماس دو فاز در این راکتور بالاتر خواهد بود. در ارتفاع نرمال ۰/۲۴ مشاهده شد ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسوئی 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 تقریباً روند افزایشی داشته به طوری که در ارتفاع ۰/۹۶ برابری نسبت به ارتفاع منبسط شده‌ی بستر در حالت سیالیت ضریب تغییر راکتورهای بازل و میتسوئی بسیار پایین و برابر با ۴/۰ و ۳/۱ درصد می‌باشد. همچنین مشاهده شد در همه‌ی ارتفاعات نرمال بستر مقدار ضریب تغییر راکتور میتسوئی کم‌تر از راکتور بازل می‌باشد که نشان از کیفیت تماس بالاتر دو فاز در این راکتور می‌باشد.

بنابراین هم‌زمان مورد استفاده در تکنولوژی میتسوئی 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 میتسوئی بوده به طوری که در ارتفاع ۰/۷۲ برابری نسبت به ارتفاع منبسط شده‌ی بستر در حالت سیالیت، بیشترین سرعت حرکت ذرات جامد در تکنولوژی بازل تقریباً دو برابر تکنولوژی میتسوئی 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 میتسوئی بالاتر از راکتور بازل می‌باشد. 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 میتسوئی می‌شوند.

۵- فهرست علائم

علائم انگلیسی

H	ارتفاع، m
D	قطر، m
U	سرعت، m/s
P	فشار، Pa

زمان، s	t
عدد رینولدز	Re
قطر ذرات، m	d
تابع توزیع شعاعی	g_0
ارتفاع اولیه بستر، m	H_0
عدد فروود	Fr
ضریب درگ	C_D
شتاب گرانش، m/s^2	g
اختلاف فشار، Pa	ΔP
ضریب برخورد	e
نوسانات سرعت، m/s	u'
سرعت حد، m/s	$v_{r,s}$

علائم یونانی

چگالی، kg/m^3	ρ
ضریب تبادل مومنوم	β
نرخ از بین رفتن انرژی جنبشی، m^2/s^3	γ
دمای گرانیولی، m^2/s^2	θ
زاویه برخورد،	φ
ویسکوزیته بالک، $kg/m^2 s^{-1}$	λ
ویسکوزیته، Pa. S	μ
کسر حجمی	ε
تنسور تنش، Pa	$\bar{\tau}$
ضریب نفوذ دمای گرانیولی، (K-m)/W	κ

زیرنویس

فاز گاز	g
فاز جامد	s
حباب	b
کمترین	min
سینتیک	$kinetic$
بالانویس	
شرایط مرجع	*

۶- منابع

- [۱] 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.
- [۲] 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.
- [۳] 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. Kalaei, 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, Gas-solid 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*, 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.
- [12] 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 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.

[YV] 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.

[YA] 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.

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

Peyman Karimzadeh-Soureshjani, Hamid Reza Norouzi*

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

* Corresponding author: h.norouzi@aut.ac.ir

Abstract

Gas-solid fluidized bed reactors are among the common methods to produce linear low-density polyethylene. The contact quality between two phases and the mixing of the solid particles in these reactors have significant impacts on the polymerization reaction. In this research, the hydrodynamic behavior 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.

KEYWORDS

Computational Fluid Dynamic, Ethylene Polymerization, Eulerian Modelling, Fluidized Bed Reactor, OpenFOAM