مجله مهندسی مکانیک مدرس، اسفند1396، دوره 17، شماره 12، ص‌ص 446-456

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

بررسی تأثیر ناهمگونی و سطح مخصوص در محیط‌های متخلخل بر عملکرد راکتورهای بستر ثابت با استفاده از روش شبکه بولتزمن

محمد طیبی رهنی[1*]، مجتبی شیدا[2]، وحید اصفهانیان[3]

1- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران
2- دانشجوی دکترا، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران
3- استاد، مرکز تحقیقات خودرو، سوخت و محیط زیست، دانشگاه تهران، تهران
* تهران، صندوق پستی 11155-11365، teaibi@sharif.edu

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 19 مهر 1396
پذیرش: 23 آبان 1396
ارائه در سایت: 01 دی 1396

کلید واژگان:
سطح مخصوص
ناهمگونی اجزاء
محیط متخلخل
واکنش شیمیایی سطحی
روش شبکه بولتزمن

چکیده

در این تحقیق واکنش کاتالیستی گاز در راکتور بستر ثابت مورد بررسی عددی قرار گرفته است. در این فرآیند جریان گاز از درون یک محیط متخلخل عبور کرده که سطوح آن از کاتالیست مس پوشانیده شده، و واکنش شیمیایی در مجاورت سطوح محیط متخلخل رخ می‌دهد. در این کار پژوهشی سیال عامل ایزوپروپانول گازی بوده که طی یک فرآیند گرماگیر در مجاورت کاتالیست به هیدروژن و استون تبدیل می‌شود. از جمله پارامترهای مورد ارزی‌ابی در این تحقیق سطح مخصوص و ناهمگونی اجزاء تشکیل‌دهنده محیط متخلخل است. این بررسی در ضریب تخلخل یکسان و با استفاده از روش شبکه بولتزمن شبیه‌سازی شد و پارامترهای نسبت تبدیل واکنش‌دهنده و افت فشار ایجاد شده در اعداد رینولدز مختلف مورد ارزیابی و بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که در راکتور با سطح مخصوص بیشتر با افزایش عدد رینولدز نسبت تبدیل واکنش‌دهنده به فرآورده نیز افزایش (تقریباً یک مرتبه) می‌یابد، اما فرآیند با افت فشار بیشتر (تقریباً 5 برابری) نیز مواجه می‌شود. همچنین گرادیان دمایی در راکتور با سطح مخصوص بیشتر یکنواخت‌تر و افت دمایی آن نیز بیشتر می‌شود. از طرفی پارامتر ناهمگونی اجزاء نیز در دو راکتور با چیدمان کوچک به بزرگ و بزرگ به کوچک مورد بررسی قرار گرفت. نتایج افت فشار نشان می‌دهد که هر دو راکتور از وضعیت یکسانی پیروی می‌کنند، اما نسبت تبدیل واکنش‌دهنده با افزایش عدد رینولدز در راکتور با ساختار بزرگ به کوچک اندکی بیشتر است.

Numerical Investigation of Non-homogeneity and Specific Area in Porous Media on Packed Bed Reactor Performance, Using Lattice Boltzmann Method

Mohammad Taeibi-Rahni[1*], Mojtaba Sheida[1], Vahid Esfahanian[2]

1- Department of Aerospace Engineering, Sharif University, Tehran, Iran.
2- Vehicle, Fuel, and Environment Research Institute, Tehran University, Tehran, Iran.
* P.O.B. 11365-11155 Tehran, Iran, taeibi@sharif.edu

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 11 October 2017
Accepted 14 November 2017
Available Online 22 December 2017

Keywords:
Specific Area
Non- homogeneity Arrangement
Porous Media
Surface Chemical Reaction
Lattice Boltzmann Method

ABSTRACT

In current research, surface reaction phenomena in several packed bed reactors have been considered. Flow field through several fractal Sierpinski carpet porous media have been simulate, using LBM. The endothermic Isopropanol dehydrogenization reaction has been considered as basic reaction mechanism and two major parameters: non-homogeneity and specific area in catalytic surface reaction have been investigated. To validate our numerical method, our results have been compared to a recent benchmark study, which adopted very well. In both cases, the porosity factor retained constant (ε=0.79). The results show that, by three times increase in specific area, the reactant conversion rate is increased significantly (approximately one order of magnitude) and the pressure drop is increased (nearly 5 times). Also, to consider non-homogeneity arrangement, the particle arrangements from small to large and from large to small have been considered. In both cases, the pressure drop is approximately the same. At low Re, reactant conversion of both arrangement are the same, but by increasing Re, the packed bed reactor with large to small arrangement has a little more reactant conversion.

1- مقدمه

واکنش کاتالیستی گاز در راکتورهای بستر ثابت یک فرآیند معمول و پرکاربرد در صنایع شیمی و پتروشیمی به حساب می‌آید. ساختار این راکتورها را می‌توان به صورت محیط‌های متخلخلی در نظر گرفت که سطوح هر کدام از اجزاء آن‌ها توسط کاتالیست‌های مطلوب پوشش‌دهی شده است. به هنگام عبور جریان گاز از این محیط‌های متخلخل، فرآیندهای انتقال حرارت و انتقال جرم به دلیل رخداد واکنش شیمیایی در مجاورت کاتالیست تقویت می‌شوند.

به طور کلی به دلیل پیچیدگی فراوان جریان سیال درون راکتورهای بستر ثابت[1] از روش‌های مختلف موجود در دینامیک سیالات محاسباتی[2] برای

[1] Fixed-bed Reactor
[2] CFD

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

M. Taeibi-Rahni, M. Sheida, V. Esfahanian, Numerical Investigation of Non-homogeneity and Specific Area in Porous Media on Packed Bed Reactor Performance, Using Lattice Boltzmann Method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 12, pp. 446-456, 2018 (in Persian)

شبیه‌سازی جریان درون آن‌ها استفاده می‌شود. در دو دهه گذشته به دلیل عدم تجهیزات محاسباتی لازم، تحقیقات صورت پذیرفته در این خصوص بیشتر بر هندسه‌های ساده و به صورت دو بعدی و با ساده‌سازی معادلات حاکمر بر جریان صورت می‌پذیرفت. با توسعه فن‌آوری‌های پردازشی شبیه‌سازی، حل مسائل دینامیک سیالاتی پیچیده‌تر با فرضیات ساده‌سازی کمتر قابلیت اجرای بیشتری پیدا نمود. از این رو کالیس و همکاران [1] در سال 2001 با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی جریان سیال را به صورت مستقیم و بدون ساده‌سازی معادلات حاکم بر جریان سیال درون راکتور بستر ثابت مشتمل بر 8-16 کره با نسبت‌های منظری 1-2 را مورد بررسی قرار دادند. این روش نیازمند شبکه‌بندی پیچیدتر و همچنین امکانات سخت‌افزاری بسیار قوی‌تری برای انجام محاسبات بود، اما نتایج به دست آمده از آن تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی داشت.

دیکسون و همکاران [2] در سال 2006 با استفاده از روش المان محدود[1] جریان درون یک راکتور بستر ثابت با سطح مقطع دایروی و اجزاء کروی را شبیه‌سازی کردند. آن‌ها جریان به همراه واکنش شیمیایی و بدون در نظر گرفتن آن بررسی کردند و اختلاف قابل ملاحظه‌ای مشاهده نکردند.

در ادامه دیکسون و همکاران [3] در سال 2007 شبیه‌سازی عددی جریان به همراه واکنش شیمیایی و انتقال حرارت برای یک راکتور بستر ثابت برای واکنش گرماگیر بازیابی متان را انجام دادند. در این کار تحقیقاتی نشان داده شد که اجزایی از راکتور که نزدیک دیواره هستند، گرادیان شدید دمایی و جرمی وجود دارد. آن‌ها دریافتند که تابع مربوط به توزیع کسر جرمی و تابع توزیع دما در اطراف اجزاء غیرمرزی راکتور (اجزایی که در مجاورت دیواره نیستند) کاملاً متقارن هستند، اما در مجاورت اجزاء متصل به دیواره انحراف شدیدی از حالت تقارن برای این دو تابع وجود دارد.

یانگ و همکاران [4] در سال 2010 شبیه‌سازی عددی جریان سیال و انتقال حرارت درون دو راکتور بستر ثابت با اجزایی به شکل‌های کروی و بیضوی را انجام دادند و نتایج را با هم مقایسه کردند.

لی و همکاران [5] در سال 2013 جریان سیال درون یک راکتور بستر ثابت را به صورت دوبعدی با استفاده از دو روش دینامیک سیالات محاسباتی و روش شبکه بولتزمن[2] بررسی کردند و نشان دادند که روش شبکه بولتزمن توانایی بسیار خوبی برای حل مسائل واکنش سطحی دارد.

چن و همکاران [6] در سال 2013 واکنش هیدروژن‌زدایی از گاز در یک راکتور بستر ثابت را به صورت دو بعدی و با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی مورد بررسی قرار دادند. مکانیزم واکنش بررسی شده در این کار پژوهشی بسیار پیچیده‌تر از کارهای مشابه پیشین بود. در این پژوهش نقش پارامترهایی مانند دمای گاز ورودی و ترکیب گاز ورودی برای رسیدن به عملکرد ایده‌ال مورد بررسی قرار گرفت.

دوان و همکاران [7] در سال 2013 دو راکتور بستر ثابت با آرایش اجزاء منظم و غیرمنظم را مورد مقایسه قرار دادند. نتیجه به دست آمده از تحقیق ایشان نشان داد که افت فشار ایجاد شده در طول راکتور بستر ثابت به صورت خطی است و تحت تأثیر پارامترهایی مانند تراکم اجزاء محیط متخلخل، سرعت جریان گاز و طول راکتور قرار دارد. آن‌ها نشان دادند که راکتور بستر ثابتی که دارای ساختار اجزاء منظم و تراکم اجزاء محیط متخلخل آن نسبت به راکتور با ساختار اجزاء غیرمنظم کمتر و با افت فشار کمتری روبه‌رو است.

ژئو و همکاران [8] در سال 2013 نیز تأثیر سرعت گاز ورودی و قطر اجزا راکتور را بر فرآیند واکنش هیدروژن و استون در راکتور بستر ثابت با اجزاء کروی مورد بررسی قرار دادند. نتایج این کار تحقیقاتی نشان داد که اجزای راکتور در هر مقطع تقریباً هم‌دما هستند و دمای اجزای راکتور در جهت جریان افزایش می‌یابد و بیشترین غلظت ایزوپروپانول در پشت اجزا راکتور ظاهر می‌شود. با افزایش سرعت ورودی، کسر جرمی ایزوپروپانول و دمای خروجی از سطح کاتالیست در خروجی کاهش می‌یابد و افت فشار کلی نیز به شدت افزایش می‌یابد. کسر جرمی ایزوپانول در خروجی با افزایش قطر اجزاء کاتالسیت نیز آشکارا کاهش می‌یابد.

در بخش اول این تحقیق ابتدا جریان سیال درون دو راکتور بستر ثابت با ضریب تخلخل یکسان و سطح مخصوص متفاوت به صورت دو بعدی مورد شبیه‌سازی عددی قرار گرفته است. هدف از این شبیه‌سازی مقایسه نسبت تبدیل واکنش‌دهنده و افت فشار ایجاد شده در این دو راکتور است. سطح مخصوص[3] به صورت نسبت کل سطح مؤثر محیط متخلخل به حجم کل این محیط تعریف می‌شود.

در بخش دوم از این تحقیق دو راکتور بستر ثابت با ضریب تخلخل یکسان و با چیدمان اجزاء کوچک به بزرگ و بزرگ به کوچک به صورت دوبعدی مورد شبیه‌سازی عددی قرار گرفته است. هدف از این شبیه‌سازی بررسی اثرات چیدمان اجزاء تشکیل‌دهنده یک محیط متخلخل بر نسبت تبدیل واکنش‌دهنده و همچنین افت فشار ایجاد شده در آن‌هاست.

در این پژوهش از واکنش گرماگیر هیدروژن‌زدایی از ایزوپروپانول به عنوان واکنش پایه استفاده شده است که در مجاورت سطوح محیط متخلخل پوشیده شده از فلز مس (کاتالیست) طی یک فرآیند گرماگیر ایزوپروپانول به هیدروژن و استون تبدیل می‌شود. رابطه تعادلی این واکنش شیمیایی به صورت رابطه (1) است.

$$(CH_3)_2CHOH_{(g)} \xleftrightarrow{\text{catalyst}} CH_3COCH_{3(g)} + H_{2(g)} \qquad (1)$$
$$\Delta H = 55.0 \text{ kJ/mol}$$

2- روش عددی

در این تحقیق از فرم کلی معادلات بقاء به روش شبکه بولتزمن برای حل مشخصه‌های هیدرودینامیکی، ترمودینامیکی و انتقال گونه‌های شیمیایی این پدیده استفاده شده است. در روش شبکه بولتزمن [9] برای حل میدان جریان از یک تابع توزیع تعادلی و برای حل معادله انرژی و هر یک از گونه‌های شیمیایی از توابع توزیع تعادلی جداگانه‌ای استفاده شده است. برای حل معادلات انتقال جرم و حرارت از مشخصات هیدرودینامیکی محاسبه شده از تابع توزیع تعادلی میدان جریان استفاده شده است.

برای تشریح روش شبکه بولتزمن ابتدا لازم است معادله بولتزمن با اعمال مدل بی.جی.کی [10] به صورت رابطه (2) بازنویسی شود.

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + v_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = -\frac{1}{\lambda}(f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}}) \qquad (2)$$

در این رابطه f_α^{eq} تابع توزیع تعادلی (توزیع ماکسول- بولتزمن) است. اولین گام برای حل عددی رابطه (2) به منظور محاسبه f، گسسته‌سازی فضای سرعت ذره v_α است. برای این منظور بدون آن که قوانین بقاء نقض شوند، ذره به حرکت با سرعت‌های خاصی (v_α) محدود می‌گردد. به عبارت دیگر فضای سرعت گسسته‌سازی می‌شود. در این تحقیق از گسسته‌سازی فضای سرعت به 9 جهت در فضای دو بعدی استفاده شده است که به صورت

[1] Finite Element Method
[2] Lattice Boltzmann Method
[3] Specific Surface

e_α در رابطه (3) نمایش داده شده‌اند.

$$e_\alpha = \begin{cases} (0,0) & \alpha = 0 \\ (\pm1,0),(0,\pm1) & \alpha = 1-4 \\ (\pm1,\pm1) & \alpha = 5-8 \end{cases} \quad (3)$$

شکل 1 نمایی از نحوه گسسته‌سازی میدان سرعت برای یک المان را نمایش می‌دهد. سرعت انتقال داده‌ها در این روش به صورت $C = \delta x/\delta t$ است که از تقسیم اندازه شبکه به اندازه گام زمانی حاصل می‌شود. تابع توزیع تعادلی نیز برای مدل D_2Q_9 به شکل رابطه (4) است.

$$f_\alpha^{(\mathrm{eq})} = \rho \cdot w_\alpha \left[1 + \frac{3}{C^2} e_\alpha \cdot u + \frac{3}{2C^4}(e_\alpha \cdot u)^2 - \frac{3}{2C^2} u \cdot u\right] \quad (4)$$

کمیت‌های ماکروسکوپیک جریان نیز با استفاده از تابع توزیع به صورت رابطه‌های (6,5) محاسبه می‌شوند.

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^{8} f_\alpha = \sum_{\alpha=0}^{8} f_\alpha^{\mathrm{eq}} \quad (5)$$

$$\rho . u = \sum_{\alpha=0}^{8} e_\alpha f_\alpha = \sum_{\alpha=0}^{8} e_\alpha f_\alpha^{\mathrm{eq}} \quad (6)$$

فرم گسسته شده رابطه (2) در زمان و مکان به ترتیب با گام زمانی δt و گام مکانی $\delta x = e_\alpha \delta t$، تبدیل به رابطه (7) می‌شود.

$$f_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(x,t) = -\frac{1}{\tau}\left[f_\alpha(x,t) - f_\alpha^{\mathrm{eq}}(x,t)\right] + S_{\mathrm{F}} \quad (7)$$

در آن τ زمان آرامش بدون بعد بوده و با استفاده از رابطه $\upsilon = c_s{}^2(\tau_\upsilon - 1/2)\delta t$ به لزجت سینماتیکی وابسته است و x نیز مختصات هر سلول در فضای محاسباتی است S_{F}، نیز به عنوان ترم منبع است که در معادله جریان به دلیل عدم اعمال نیروهای خارجی از این ترم صرفه نظر می‌شود. با توجه به وجود پدیده واکنش شیمیایی در مجاورت سطح کاتالیست که جذب انرژی و تبدیل گونه شیمیایی واکنش‌دهنده به فرآورده را به همراه دارد، مقادیر عبارات منبع برای معادلات انتقال انرژی و گونه‌های شیمیایی متناسب با نرخ واکنش مدل‌سازی می‌شوند. رابطه (7) معمولاً در دو مرحله و به صورت روابط (9,8) حل می‌شود.

مرحله برخورد با رابطه (8) به دست می‌آید.

$$\tilde{f}_\alpha(x, t+\delta t) - f_\alpha(x,t) = -\frac{1}{\tau}\left[f_\alpha(x,t) - f_\alpha^{\mathrm{eq}}(x,t)\right] \quad (8)$$

مرحله انتقال ار رابطه (9) حاصل می‌شود.

$$f_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) = \tilde{f}_\alpha(x, t + \delta t) \quad (9)$$

در آن $\tilde{f}_\alpha$ بیان‌کننده وضعیت پس از برخورد است.

معادلات بقای جرم و انرژی نیز با استفاده از نرخ واکنش سطحی محاسبه شده با یکدیگر ارتباط پیدا می‌کنند که این ارتباط با استفاده از ترم منبع S_{F}

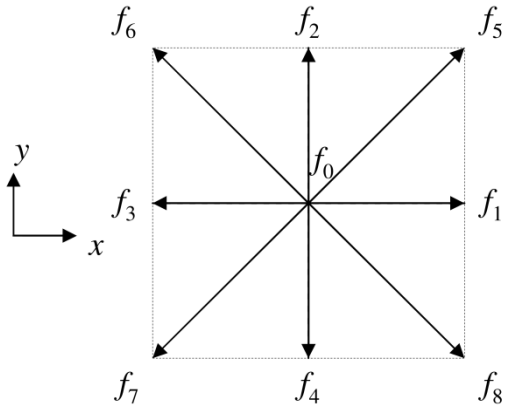


Fig. 1 D_2Q_9 LBM

شکل 1 شبکه بولتزمن دوبعدی با گسسته سازی میدان سرعت در 9 جهت

برای معادلات انتقال جرم و انرژی به صورت روابط (11,10) است.

$$Q_T^* = QR_{\mathrm{react}} L_0/(\rho_{\mathrm{mix}} C_P T_0 U_0) \quad (10)$$

$$Q_{Y^\sigma}^* = \lambda^\sigma M^\sigma R_{\mathrm{react}} L_0/(\rho_{\mathrm{mix}} U_0) \quad (11)$$

در آن Q انرژی جذب یا آزاد شده از واکنش بوده و T_0 دمای مشخصه است که در شبیه‌سازی‌های صورت پذیرفته در این تحقیق برابر دمای سیال ورودی در نظر گرفته شده است. L_0 طول مشخصه بوده و برابر با طول حقیقی محیط متخلخل قرار داده شده است. U_0 نیز سرعت مشخصه بوده و از آن‌جایی که در این شبیه‌سازی ابعاد شبکه و مقیاس زمانی برابر با هم است که برابر با یک در نظر گرفته شده است. C_{P} ظرفیت حرارتی مخلوط واکنش‌دهنده و فرآورده‌هاست که با استفاده از مقادیر نسبت‌های جرمی گونه‌های شیمیایی و ظرفیت حرارتی آن‌ها با استفاده از رابطه (12) محاسبه می‌شود.

$$C_P = \sum_\sigma (Y^\sigma C_P^\sigma) \quad (12)$$

R_{react} نیز نرخ واکنش شیمیایی است که متناسب با گونه‌های شیمیایی و نوع واکنش مشخص می‌شود که در این تحقیق به منظور صحت‌سنجی روابط و همچنین کد عددی توسعه داده شده از روابط اشاره شده در مرجع [5] استفاده شده است. در این مرجع به واکنش هیدروژن‌زدایی از ایزو-پروپانول در مجاورت کاتالیستی از جنس مس پرداخته شده که ایزو-پروپانول با قرار گرفتن در مجاورت فلز مس و جذب انرژی حرارتی لازم به استون و هیدورژن تبدیل می‌شود.

برای محاسبه نرخ واکنشی نیز از مراجع [11,5] استفاده شده است که متناسب با فشار نسبی ایزو- پروپانول، استون و هیدروژن و ضرایب واکنشی مربوطه به صورت رابطه (13) محاسبه و استفاده می‌شود.

$$R_{\mathrm{react}} = kK_{\mathrm{Ipa}} P_{\mathrm{iso}} \left(1 + K_{\mathrm{Ipa}} P_{\mathrm{iso}} + K_{\mathrm{H_2}}{}^{1/2} P_{\mathrm{H_2}}{}^{1/2} + K_{\mathrm{ace}} P_{\mathrm{ace}} + \acute{K} P_{ace} P_{\mathrm{H_2}}{}^{1/2}\right)^{-2} \quad (13)$$

در این رابطه، k و $\acute{K}$ ضرایب واکنشی بوده و K_{iso}، $K_{\mathrm{H_2}}$ و K_{ace} به ترتیب ثابت‌های تعادلی واکنشی ایزو- پروپانول، هیدروژن و استون است. P_{iso}، $P_{\mathrm{H_2}}$ و P_{ace} نیز فشارهای نسبی ایزو- پروپانول، هیدروژن و استون هستند. ضرایب تعادلی در نظر گرفته شده در این شبیه‌سازی همان مقادیر مورد استفاده در مراجع [11,5] است که در جدول 1 شرح داده شده‌اند.

2-1- اعتبارسنجی و استقلال حل از شبکه

جهت اعتبارسنجی روش عددی مورد استفاده از حل معادله واکنش تعادلی رابطه (1) در مجاورت کاتالیست مس از ساختار محیط متخلخل، قالیچه سیرپینسکی[1] با ضریب تخلخل 79.0 استفاده شده است (شکل 2). با توجه به در دسترس بودن نتایج لی و همکاران [5] شرایط مرزی در نظر گرفته شده در این تحقیق دقیقاً مشابه کار آن‌ها در نظر گرفته شده است. سرعت ورودی برابر 0.01 متر بر ثانیه در نظر گرفته شده و از شرط مرزی خروجی با گرادیان

جدول 1 مقادیر ضرایب ثابت مورد استفاده در رابطه (13)

Table 1 Constant coefficient value of equation (13)

پارامتر	مقدار	واحد
k	16.3	$\mathrm{mol/m^2s}$
$\acute{K}$	$3.41\mathrm{x}10^{-12}$	$\mathrm{atm}^{-3/2}$
K_{iso}	37.4	atm^{-1}
$K_{\mathrm{H_2}}$	0.062	atm^{-1}
K_{ace}	18.1	atm^{-1}

[1] Sierpinski Carpet

صفر برای حل معادلات انتقال حرارت و گونه‌های شیمیایی در خروجی دامنه حل استفاده شده و برای حل میدان جریان از شرط مرزی فشار در خروج از دامنه محاسباتی استفاده شده است. از شرط مرزی بازگشتی نیز برای سطح جسم صلب و دیواره‌های جانبی استفاده شده است.

شکل 3 نمایی از خطوط جریان حاصل از شبیه‌سازی صورت پذیرفته را نمایش می‌دهد. همان طوری که مشاهده می‌شود خطوط جریان کاملاً متقارن بوده و اثری از ناپایداری جریان در این رژیم جریان مشاهده نمی‌شود.

شکل 4 نمایی از کانتورهای مؤلفه افقی سرعت، دما و کسر جرمی ایزوپروپانول را نمایش می‌دهد. تقارن میدان جریان در کانتور مؤلفه افقی سرعت (شکل 4-a) به خوبی در این شکل نیز مشاهده می‌شود که از حل پایای جریان حکایت دارد. با توجه به شرط مرزی انتخاب شده و تعیین دمای دیواره‌های بالایی و پایینی و دمای سیال ورودی انتظار تقارن در کانتور دما نیز وجود دارد که در شکل 4-b این امر نمایان است. از سوی دیگر با توجه به گرماگیر بودن این واکنش، جریان با عبور از این سطوح دچار افت حرارت می‌شود و این حرارت صرف انجام واکنش و تبدیل ایزوپروپانول به استون و هیدروژن می‌شود. این پدیده به خوبی در شکل‌های مربوط به کانتور دما (شکل 4-b) و کانتور کسر جرمی ایزوپروپانول (شکل 4-c) قابل مشاهده است.

شکل 5 نمایی از مقایسه پروفیل مؤلفه افقی سرعت نتایج حل حاضر با نتایج لی و همکاران را در مقطع میانی (شکل 5-a) و خروجی (شکل 5-b) دامنه محاسباتی را نشان می‌دهد. همان گونه که مشاهده می‌شود نتایج شبیه‌سازی در شبکه 91x91 به نتایج حل به روش شبکه بولتزمن لی و

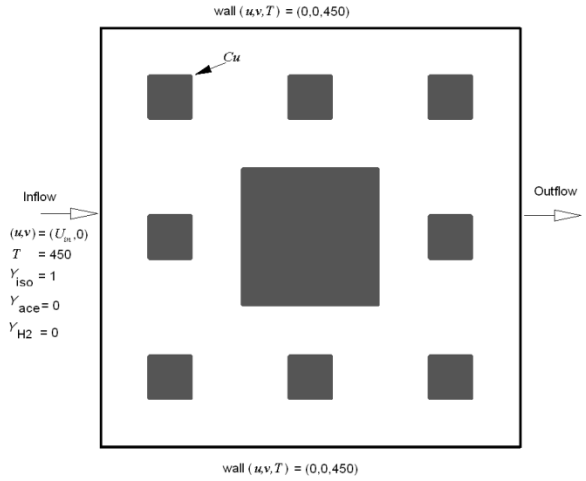


Fig. 2 Physical domain and Boundary conditions

شکل 2 نمایی از هندسه فیزیکی مسأله و شرایط مرزی

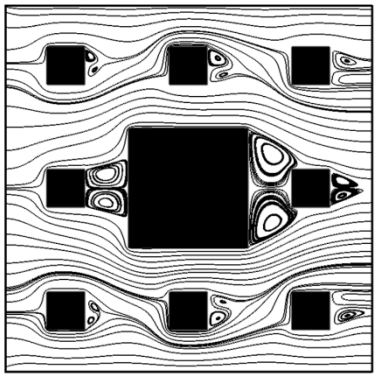


Fig. 3 Flow field streamline

شکل 3 نمایی از خطوط جریان

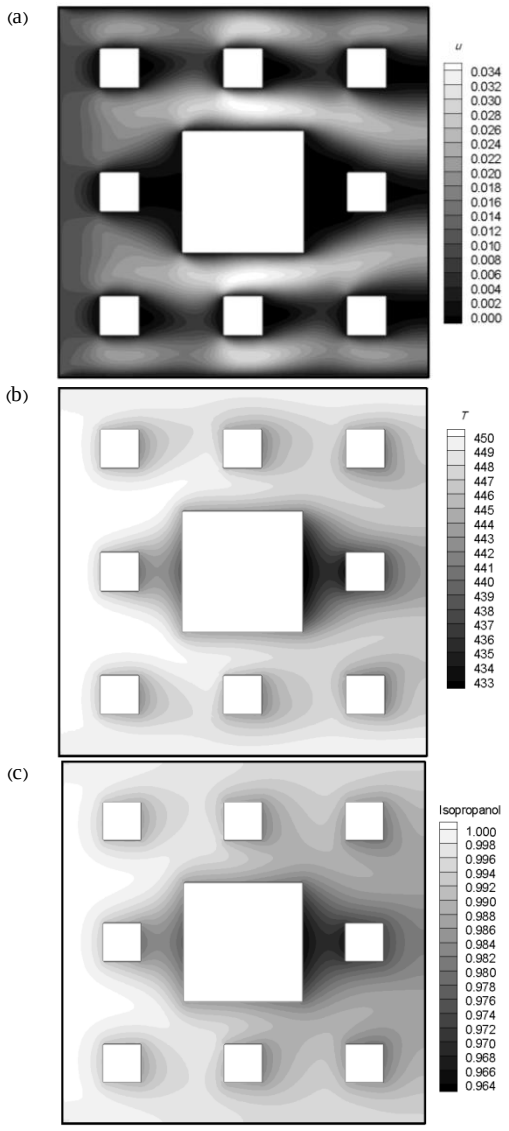


Fig. 4 Contours of a- X- component of the velocity in m/s, b- temperature in K, c- isopropanol mass fraction

شکل 4 نمایی از کانتورهای الف- مؤلفه افقی سرعت برحسب متر بر ثانیه، ب- دما برحسب درجه کلوین، پ- کسرجرمی ایزوپروپانول

همکاران نزدیک‌تر است، در صورتی که در شبکه متراکم‌تر 181x181 و271x271 این نتایج از نتایج روش شبکه بولتزمن ایشان اندکی فاصله گرفته و به نتایج روش شبکه حجم محدود نزدیک‌تر می‌شود. این مطلب در بخش خروجی دامنه محاسباتی (شکل 5-b) مشهودتر است.

شکل 6 نیز پروفیل دما در مقطع میانی (شکل 6-a) و خروجی (شکل 6-b) دامنه محاسباتی را نشان می‌دهد. همان طوری که مشاهده می‌شود نتایج رفتاری مشابه را نشان می‌دهند. به طوری که بیشینه اختلاف به کمتر از 0.3% می‌رسد که این مقدار اختلاف بسیار کمتر از نتایج به دست در تحقیق لی و همکاران [5] است. نکته قابل ملاحظه‌ای که از مقایسه نتایج حاصل از شبکه 181x181 با شبکه درشت‌تر قابل استنباط است، تمایل نتایج به نتایج حاصل از روش حجم محدود با افزایش تراکم شبکه است. از آن‌جایی که المان‌های هندسی مورد استفاده در این شبیه‌سازی از پیچیدگی زیادی برخوردار نیست می‌توان دریافت که با در شبکه یکسان دقت نتایج حل به روش حجم محدود بیشتر از روش شبکه بولتزمن است. این امر ضرورت

استفاده از شبکه متراکم‌تر در روش شبکه بولتزمن را تأیید کرده و بر الزام انجام مرحله استقلال حل از شبکه در روش شبکه بولتزمن تأکید می‌کند. این مسأله در شکل 7 نیز قابل مشاهده است که پروفیل کسر جرمی ایزوپروپانول در مقطع میانی و خروجی دامنه محاسباتی را نشان می‌دهد. مقایسه نتایج نشان از وجود تطابق بسیار خوبی میان نتایج حاصل و نتایج مطالعه مرجع دارد. در این بخش نیز می‌توان دریافت که اختلاف میان نتایج حل به روش شبکه بولتزمن و روش حجم محدود با متراکم‌تر شدن شبکه کاهش می‌یابد و به کمتر از 0.4% می‌رسد.

3- نتایج و بحث

در این بخش ابتدا به ارائه نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی جریان پیرامون دو مدل هندسی با ضریب تخلخل یکسان و سطح مخصوص متفاوت پرداخته شده و سپس به بررسی و تحلیل نتایج دو مدل هندسی دیگر با ضریب تخلخل یکسان و چیدمانی متفاوت اجزاء پرداخته خواهد شد.

به طور کلی شرایط مرزی جریان ورودی به راکتورها ایزوپروپانول خالص بوده و برای سرعت‌های ورودی 0.005 m/s الی 0.03 m/s و دمای ورودی 450 درجه کلوین، این شبیه‌سازی‌ها و تحلیل‌ها صورت پذیرفته است. شرایط مرزی و ضرایب مورد استفاده نیز مطابق بخش صحت‌سنجی انتخاب شده است. برای شبیه‌سازی از فرض جریان سیال پایا استفاده شده است. دمای دیواره فوقانی و تحتانی در کل فرآیند ثابت و برابر دمای سیال ورودی به دامنه محاسباتی در نظر گرفته شده است، همچنین گاز چند جزیی مورد بررسی به عنوان گاز ایده‌آل در نظر گرفته شده است. در این مسأله سرعت ورودی به عنوان پارامتر متغیر و نسبت کسر جرمی فرآورده و واکنش‌دهنده و

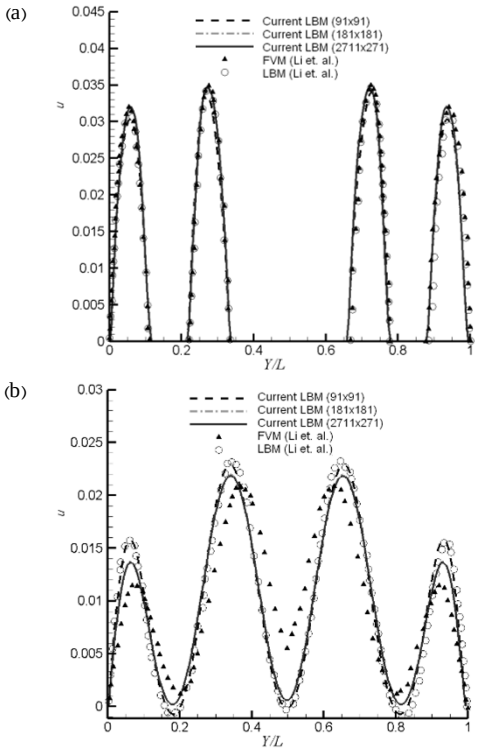


Fig. 5 Profile of X-component of the velocity (m/s) a- at midline and b- end line of computational domain in compare of Li etal [5].

شکل 5 نمایی از مقایسه پروفیل مولفه افقی سرعت نتایج حل حاضر با نتایج لی و همکاران [5] برحسب متر بر ثانیه الف- در مقطع میانی و ب- در مقطع خروجی دامنه محاسباتی

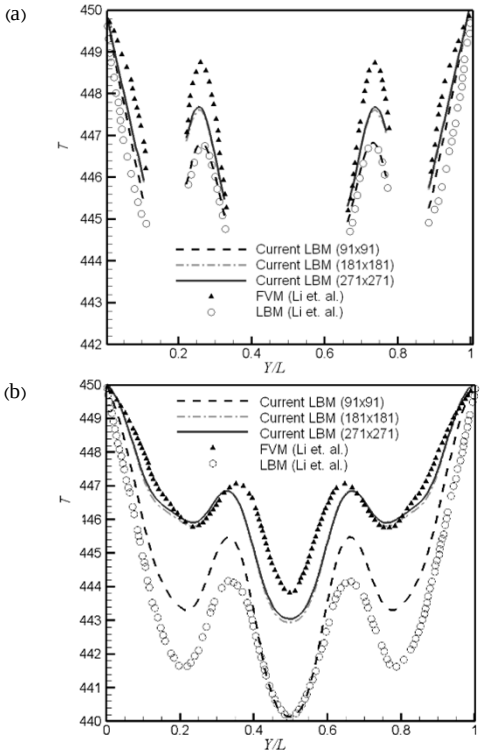


Fig. 6 Profile of temperature in K a- at midline and b- end line of computational domain in compare of Li etal. [5]

شکل 6 نمایی از مقایسه پروفیل دمای نتایج حل حاضر با نتایج لی و همکاران [5] برحسب درجه کلوین الف- در مقطع میانی و ب- در مقطع خروجی دامنه محاسباتی

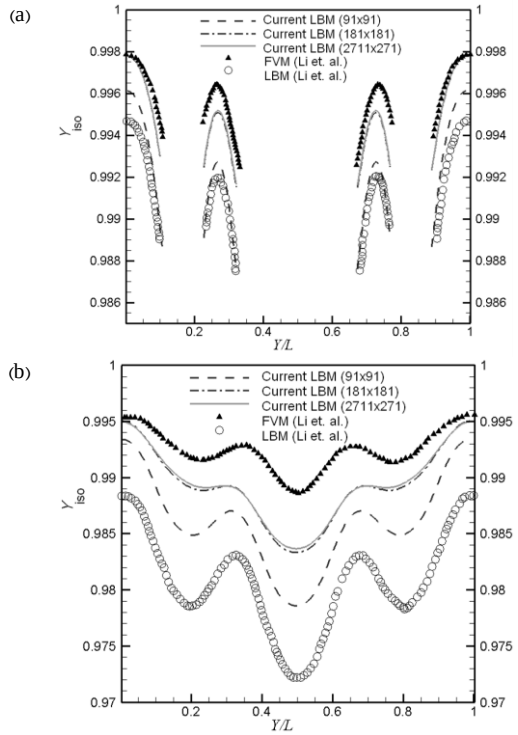


Fig. 7 Profile of isopropanol concentration a- at midline and b- end line of computational domain in compare of Li et.al. [5]

شکل 7 نمایی از مقایسه پروفیل کسر جرمی ایزوپروپانول حل حاضر با نتایج لی و همکاران [5] الف- در مقطع میانی و ب- در مقطع خروجی دامنه محاسباتی

همچنین افت فشار درون راکتور به عنوان پارامتر متاثر مورد ارزیابی و بررسی قرار گرفته‌اند.

3-1- بررسی مدل هندسی با ضریب تخلخل یکسان و سطح مخصوص متغیر

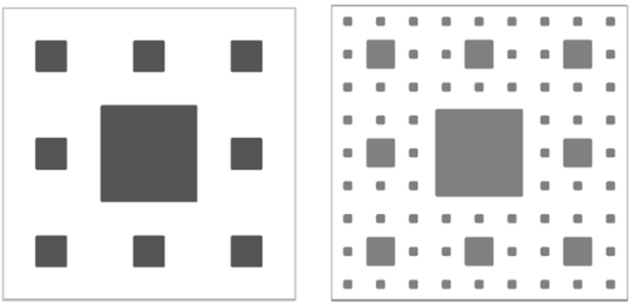
برای بررسی اثر سطح مخصوص در راکتورهای بستر ثابت از دو راکتور با ضریب تخلخل یکسان و سطح مخصوص متفاوت استفاده شده که هندسه این دو راکتور بستر ثابت در شکل 8 نمایش داده شده است. ضریب تخلخل هر کدام از راکتورها 0.79 در نظر گرفته شده و سطح مخصوص آن‌ها نیز به ترتیب $1.47\ m^{-1}$ و $0.59\ m^{-1}$ است.

همان طور که در شکل 8-a نیز مشاهده می‌شود، در ساختار این محیط متخلخل از اجزاء کوچک، متوسط و بزرگ برای پر کردن فضای این راکتور استفاده شده است (راکتور شماره 1). این امر سبب افزایش سطح مخصوص این راکتور در مقایسه با راکتور نمایش داده شده در شکل 8-b می‌شود که از اجزاء متوسط و بزرگ در ساختار آن استفاده شده است (راکتور شماره 2). برای ایجاد ضریب تخلخل یکسان در هر دو هندسه، در راکتور شماره 1 از اجزایی با ابعاد کوچکتر در مقایسه با راکتور شماره 2 استفاده شده تا بتوان به ضریب تخلخل یکسانی در هر دو راکتور دست یافت.

شکل 9 خطوط جریان عبوری از پیرامون هر دو محیط متخلخل را نمایش می‌دهد. همان گونه که ملاحظه می‌شود به دلیل وجود اجزاء متخلخل متعدد در راکتور با سطح مخصوص بیشتر بخش عمده‌ای از جریان مسیر طولانی‌تری را طی می‌کند (شکل 9-a) تا از میدان جریان خارج شود. این امر فرصت بیشتری به جریان می‌دهد تا در مجاورت سطح کاتالیست قرار گیرد که نتیجه آن افزایش نرخ واکنش شیمیایی و انتقال حرارت است.

شکل 10 کانتورهای مؤلفه افقی سرعت برای هر دو راکتور در سرعت جریان ورودی 0.01 متر برثانیه را نمایش می‌دهد. از بررسی این شکل می‌توان دریافت که نواحی سرعت پایین در راکتور شماره 1 (با سطح مخصوص بیشتر) بسیار بیشتر از راکتور شماره 2 (با سطح مخصوص کمتر) است. وجود این نواحی با سرعت کم به منزله افزایش زمان اقامت سیال در راکتور است که به نوبه خود افزایش نرخ واکنش و انتقال حرارت به همراه دارد.

شکل 11 نمایی از کانتورهای دمایی برای هر دو راکتور را نمایش می‌دهد. همان طوری که انتظار آن می‌رفت گرادیان‌های دمایی در راکتور شماره 1 بیشتر از راکتور شماره 2 است، به طوری که افت دمای ایجاد شده



(b) (a)

Fig. 8 physical domain of same porosity 0.79 with a- specific area $1.47 m^{-1}$ b- and specific area $0.59\ m^{-1}$.

شکل 8 نمایی از هندسه‌های محیط متخلخل با ضریب تخلخل 0.79 با الف- سطح مخصوص $1.47 m^{-1}$ و ب- سطح مخصوص $0.59\ m^{-1}$

(a)

(b)

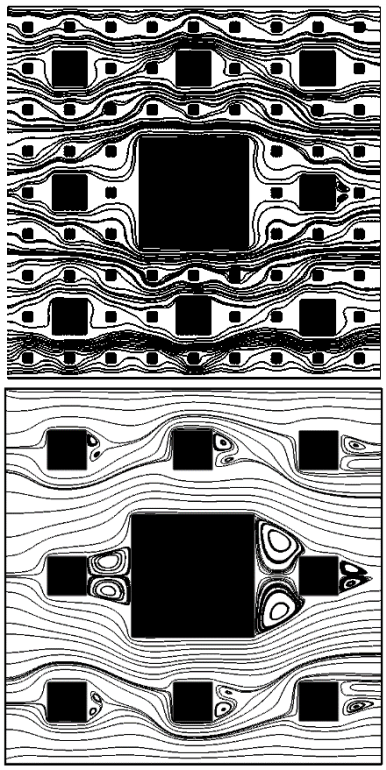


Fig. 9 Flow field streamline of same porosity 0.79 with a- specific area $1.47 m^{-1}$ and b- specific area $0.59\ m^{-1}$.

شکل 9 نمایی از خطوط جریان پیرامون محیط متخلخل با ضریب تخلخل 0.79 با الف- سطح مخصوص $1.47 m^{-1}$ و ب- سطح مخصوص $0.59\ m^{-1}$

(a)

(b)

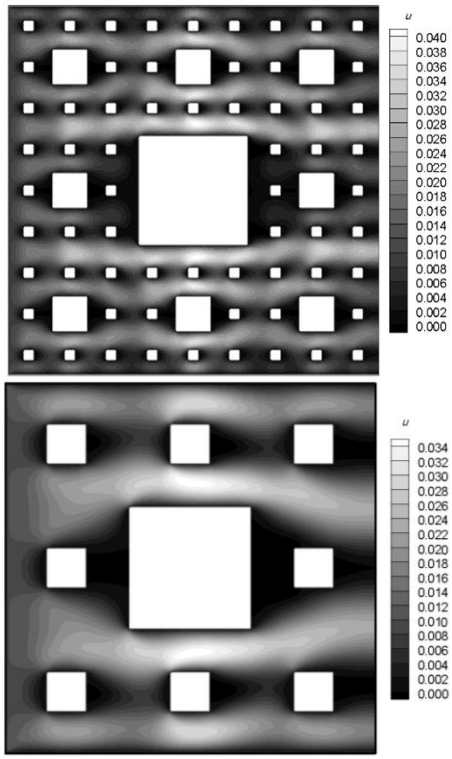


Fig. 10 X-component velocity contour of two porous media in same porosity 0.79 with a- specific area $1.47 m^{-1}$ and b- specific area $0.59\ m^{-1}$.

شکل 10 نمایی از مؤلفه افقی سرعت (m/s) در دو محیط متخلخل با ضریب تخلخل 0.79 با الف- سطح مخصوص $1.47 m^{-1}$ و ب- سطح مخصوص $0.59\ m^{-1}$

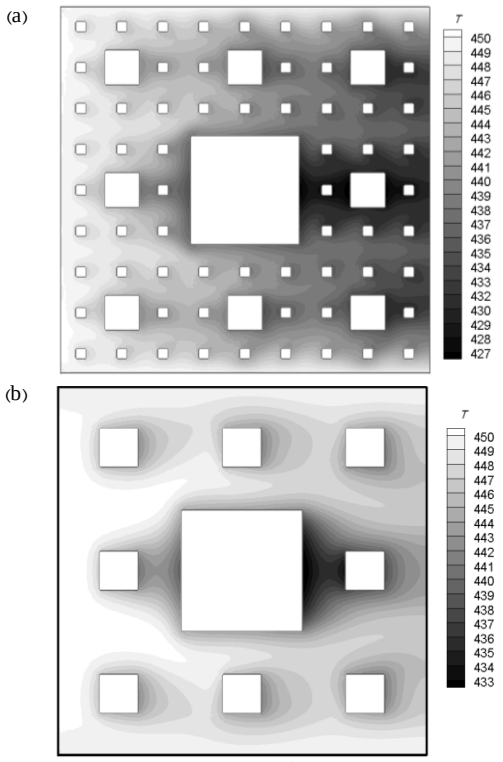


Fig. 11 Temperature (K) contour of two porous media in same porosity 0.79 with a- specific area 1.47m^{-1} and b- specific area 0.59 m^{-1}.

شکل 11 نمایی از کانتورهای دمایی (K) در محیط متخلخل با ضریب تخلخل 0.79 با الف- سطح مخصوص 1.47m^{-1} و ب- سطح مخصوص 0.59 m^{-1}

در راکتور شماره 1 (شکل 11-a) بسیار بیشتر از راکتور شماره 2 (شکل 11-b) است. با توجه به این گرادیان‌های دمایی ایجاد شده می‌توان پیش‌بینی نمود که میزان تبدیل واکنش‌دهنده در راکتور شماره 1 بسیار بیشتر از راکتور شماره 2 باشد. زیرا برای افزایش نسبت تبدیل واکنش‌دهنده نیاز به جذب انرژی حرارتی بیشتری است که افت دمایی ایجاد شده در راکتور شماره 1 گواه این مسأله خواهد بود.

این امر در شکل 12 که کانتورهای کسر جرمی واکنش‌دهنده ایزوپروپانول را نشان می‌دهد، نیز قابل مشاهده است. به طوری که میزان افزایش نرخ مصرف واکنش‌دهنده در راکتور شماره 1 (شکل 12-a) بیشتر از راکتور شماره 2 (شکل 12-b) است. از دیگر موارد قابل استخراج از این نتایج یکنواختی بیشتر دما و گونه‌های شیمیایی در مقطع خروجی راکتور شماره 1 است.

از آن‌جایی که هندسه دو راکتور مورد بررسی متفاوت است، قطر معادل هر کدام نیز متفاوت خواهد بود. در صورت استفاده از این قطر، با وجود شرایط یکسان حاکم بر جریان ورودی و شرایط مرزی، دامنه تغییرات اعداد رینولدز و پکلت متفاوت خواهد شد و مقایسه مناسبی از نتایج این دو راکتور حاصل نخواهد شد. از این‌رو برای نمایش نتایج حاصل برحسب اعداد بدون بعد پکلت (رابطه (14)) و رینولدز (رابطه (15)) از عرض راکتور به عنوان طول مشخصه استفاده شده است.

$$\mathrm{Pe} = \frac{hu}{D_{\mathrm{iso}}} \tag{14}$$

$$\mathrm{Re_h} = \frac{hu}{\upsilon} \tag{15}$$

که در آن D_{iso} ضریب پخش ایزوپروپانول، υ لزجت سینماتیکی و h عرض محیط متخلخل است.

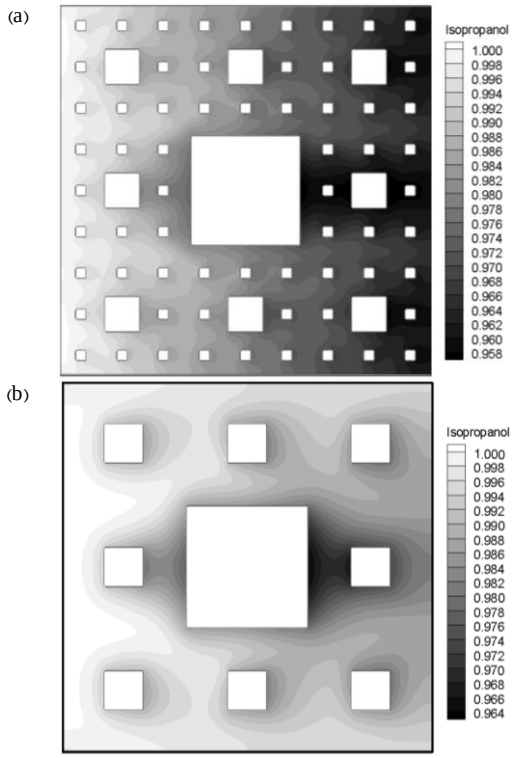


Fig. 12 Isopropanol mass fraction contour of two porous media in same porosity 0.79 with a- specific area 1.47m^{-1} and b- specific area 0.59 m^{-1}

شکل 12 نمایی از کانتورهای کسر جرمی ازوپروپانول در محیط متخلخل با ضریب تخلخل 0.79 با الف- سطح مخصوص 1.47m^{-1} و ب- سطح مخصوص 0.59 m^{-1}

شکل 13 نمودار مقایسه‌ای نسبت تبدیل واکنش‌دهنده در اعداد پکلت 4-25 را برای هر دو راکتور نمایش می‌دهد. همان طوری که در این نمودار نیز مشاهده می‌شود، تأثیر سطح مخصوص بر نسبت تبدیل واکنش‌دهنده قابل ملاحظه است. به نحوی که با افزایش سه برابری سطح مخصوص نسبت تبدیل واکنش‌دهنده بیش از 5 برابر افزایش می‌یابد. این افزایش در نسبت تبدیل از یک سو به افزایش سطح مؤثر در پدیده واکنش سطحی مرتبط بوده و از سوی دیگر با افزایش سطح مخصوص اثرات انسدادی در مقابل جریان افزایش یافته و سبب کاهش سرعت جریان درون محیط متخلخل می‌شود. از این‌رو ایزوپروپانول (واکنش‌دهنده) زمان بیشتری در مجاورت سطوح کاتالیست قرار گرفته و افزایش زمان ماندگاری جریان و افزایش نرخ واکنش سطحی را به همراه خواهد داشت. این دو امر منجر به افزایش قابل ملاحظه در نسبت تبدیل کسر جرمی واکنش‌دهنده به فرآورده می‌شود.

به منظور صحه‌گذاری دوباره نتایج به دست آمده افت فشار محاسبه شده با رابطه شبه تجربی کارمن- کوزنی (رابطه (16)) مورد مقایسه و بررسی قرار گرفته است [12]. این رابطه براساس نتایج تجربی به دست آمده که در آن ε ضریب تخلخل، μ لزجت دینامیکی، u سرعت جریان ورودی، Φ_S ضریب گردی[1] و D_p قطر معادل ذرات تشکیل‌دهنده محیط متخلخل است. با توجه به طول یکسان هر دو راکتور که معادل L است، رابطه یادشده به صورت رابطه (17) تبدیل می‌شود.

$$\nabla P = \frac{dp}{dx} = -\frac{180\mu u(1-\varepsilon)^2}{\Phi_s^2\, {D_p}^2 \varepsilon^3} \tag{16}$$

$$\Delta P = -\frac{180\mu u(1-\varepsilon)^2}{\Phi_s^2\, {D_p}^2 \varepsilon^3} L \tag{17}$$

[1] Sphericity

این قطر معادل برای محیط متخلخل دو بعدی از نسبت سطح به محیط ذرات تشکیل‌دهنده محیط متخلخل و با استفاده از رابطه (18) قابل محاسبه است.

$$D_{\mathrm{p}} = 4\,A/S \tag{18}$$

با استفاده از این رابطه قطر معادل در راکتور اول تقریباً برابر $6.6\mathrm{x}10^{-3}$ متر و در راکتور دوم برابر $1.1\mathrm{x}10^{-2}$ متر به دست خواهد آمد و از آن‌ها در رابطه کارمن- کوزنی برای محاسبه افت فشار استفاده شده است. همان طوری که پیشتر نیز عنوان شد با توجه به شرایط جریان یکسان حاکم بر هر دو راکتور و اختلاف قطر معادل آن‌ها، اعداد رینولدز و پکلت دو راکتور دچار اختلاف شده و مقایسه دو راکتور را دچار مشکل می‌نماید؛ بنابراین برای نمایش و مقایسه بهتر و مناسب‌تر نتایج در اعداد بدون بعد رینولدز و پکلت از مقیاس طولی یکسان دیگری برای هر دو راکتور استفاده می‌شود که در اغلب موارد این معیار از قطر معادل به عرض راکتور تغییر می‌یابد (رابطه‌های (15,14)). اعداد رینولدز محاسبه شده با قطر معادل در مقایسه با اعداد رینولدز محاسبه شده با عرض راکتور تقریباً از نسبت یک به 10 پیروی می‌کنند. به طوری که بیشینه عدد رینولدز 157 محاسبه شده با مقیاس طولی در راکتور اول و دوم به ترتیب تقریباً برابر اعداد رینولدز 7 و 12 با معیار مقیاس طولی قطر معادل است.

شکل 14 نمودار افت فشار بدون بعد شده با فشار دینامیکی ($\rho_{\mathrm{in}}U_{\mathrm{in}}^2$) درون راکتور برای اعداد رینولدز 25-157 با طول مشخصه ارتفاع راکتور را در مقایسه با افت فشار محاسبه شده از رابطه کارمن- کوزنی (با استفاده از قطر معادل محاسبه شده برای هر راکتور) نمایش می‌دهد. همان طوری که مشاهده می‌شود، تطابق بسیار خوبی میان نتایج به دست آمده و نتایج رابطه کارمن- کوزنی وجود دارد و بیشینه اختلاف مشاهده شده میان نتایج کمتر از 8% است که با توجه به شبه- تجربی بودن رابطه کارمن- کوزینی این اختلاف قابل قبول بوده و به نحوی دیگر نتایج به دست آمده از این شبیه‌سازی‌ها را صحه‌گذاری می‌نماید. دوباره باید خاطر نشان نمود که اعداد رینولدز با طول مشخصه قطر معادل بسیار کمتر از اعداد رینولدز محاسبه شده با مقیاس عرض راکتور است. پدیده مورد بررسی در این مقاله در اعداد رینولدز (محاسبه شده با قطر معادل) بسیار کمی در حال انجام است. با حاکم بودن رابطه دارسی تا محدوده اعداد رینولدز 10 می‌توان انتظار داشت که رژیم جریان حاکم از رابطه دارسی تبعیت نماید. این امر به خوبی در شکل 14 قابل استنباط است، به طوری که در اعداد رینولدز پایین اختلاف نتایج به دست آمده با نتایج حاصل از رابطه کارمن-کوزینی بسیار کم است، در حالی که با افزایش عدد رینولدز این اختلاف افزایش می‌یابد. این امر به نحوی نشان می‌دهد که در اعداد رینولدز پایین بیشترین سهم افت فشار ناشی از لزجت جریان است و با افزایش عدد رینولدز و به نوبه آن افزایش مومنتوم جریان، سهم بخش اینرسی جریان افزایش می‌یابد و سبب ایجاد خطا در این ناحیه می‌گردد. از سوی دیگر رفتار این نمودار نشان می‌دهد که مومنتوم و فشار دینامیکی جریان ورودی با افزایش رینولدز جریان افزایش می‌یابد. البته نسبت افت فشار درون راکتور با نرخ افزایش فشار دینامیکی متناسب نبوده و در نمودار مربطه به صورت کاهش نمایی مشاهده می‌شود. از این‌رو با پیروی این نمودار از رابطه شبه‌تجربی کارمن-کوزینی و قرارگیری آن در اعداد رینولدز کم می‌توان پی‌برد که بخش عمده جریان مورد بررسی که در اعداد رینولدز پایین به وقوع می‌پیوندد، در رژیم جریان دارسی قرار دارد.

این امر با بررسی ضریب گذردهی نیز قابل استنباط است که در این مسأله با استفاده از رابطه (19) محاسبه می‌شود. که در آن K ضریب گذردهی است که برای بی‌بعدسازی آن می‌توان از طول مشخصه عرض محیط متخلخل استفاده نمود، که فرم بدون بعد آن به صورت رابطه (20) است. با توجه به سطح مقطع و دبی ورودی و خروجی یکسان (جریان تراکم‌ناپذیر)، در مسأله حاضر رابطه استفاده شده برای محاسبه ضریب گذردهی به نحوی همان رابطه دارسی است که ضریب گذردهی را به افت فشار ایجاد شده درون محیط متخلخل و دبی جریان ورودی مرتبط می‌نماید [13].

$$K = -\frac{\mu}{\nabla P}u \tag{19}$$

$$K/{D_h}^2 = -\frac{\mu}{\nabla P}u/{D_h}^2 \tag{20}$$

نمودار بررسی ضریب گذردهی بدون بعد در اعداد رینولدز مورد بررسی در شکل 15 نمایش داده شده است. همان طوری که مشاهده می‌شود ضریب گذردهی در راکتور شماره 1 بسیار کمتر از راکتور شماره 2 بوده که به دلیل افزایش اثرات انسدادی موجود در راکتور شماره 1 است. از سوی دیگر ضریب گذردهی در هر دو راکتور با تغییر عدد رینولدز تقریباً ثابت است که به نحوی پیروی جریان از رابطه دارسی را نشان می‌دهد.

3-2- بررسی مدل هندسی با ضریب تخلخل یکسان و چیدمانی متفاوت

جهت بررسی اثرات چیدمانی اجزاء تشکیل‌دهنده محیط متخلخل نیز از دو هندسه با چیدمان اجزاء کوچک به بزرگ (شکل 15-a) و بزرگ به کوچک (شکل 16-b) استفاده شده است که واکنش شیمیایی هیدروژن‌زایی از ایزوپروپانول دقیقاً روی سطوح اجزاء آن شبیه‌سازی شده است. ضریب تخلخل هر کدام از راکتورها 0.79 در نظر گرفته شده و سطح مخصوص آن‌ها نیز برابر $0.56\mathrm{m}^{-1}$ تعیین شده است. با توجه به هندسه در نظر گرفته شده

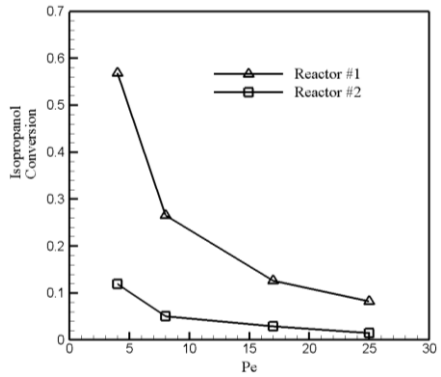


Fig. 13 Isopropanol conversion respect to $\mathrm{Pe_h}$ variation from 4 to 25.

شکل 13 نمودار مقایسه‌ای نسبت تبدیل واکنش‌دهنده برای اعداد پکلت 4-25

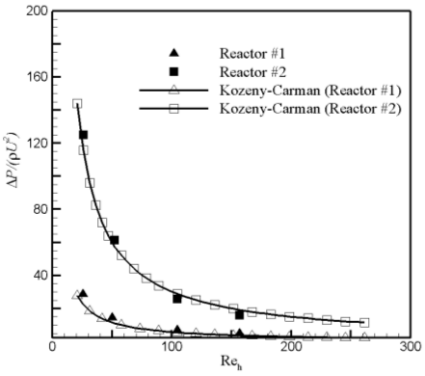


Fig. 14 Dimensionless pressure drop across packed bed reactor in respect to $\mathrm{Re_h}$ variation from 25 to 157.

شکل 14 نمودار مقایسه‌ای افت فشار بدون بعد برای اعداد رینولدز 25-157

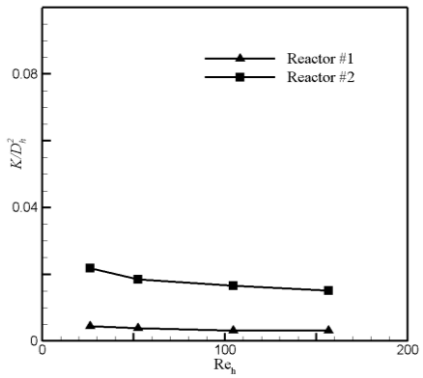


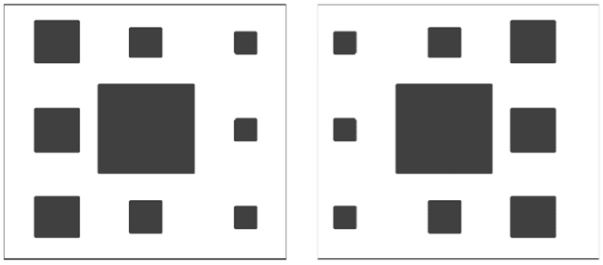
Fig. 15 Dimensionless permeability coefficient across packed bed reactor in respect to Re_h variation from 25 to 157

شکل 15 نمودار تغییرات ضریب گذردهی بدون بعد برای اعداد رینولدز 25-157

برای این راکتورها، ضریب تخلخل و سطح مخصوص هر دو راکتور با یکدیگر برابر بوده و تنها در چیدمان اجزاء با هم متفاوت هستند.

شکل 17 کانتورهای مؤلفه افقی سرعت با سرعت ورودی 0.01 متر بر ثانیه برای هر دو راکتور نمایش داده شده است. همان طوری که مشاهده می‌شود، دامنه تغییرات سرعت در هر دو راکتور تقریباً یکسان است، اما در خروجی راکتور با چیدمانی بزرگ به کوچک گرادیان‌های مؤلفه افقی سرعت کمتر بوده و جریان یکنواخت تری را به نمایش می‌گذارد.

شکل 18 نیز کانتورهای دمایی برای هر دو راکتور مورد نظر را نمایش می‌دهد. همان طوری که ملاحظه می‌شود یکنواختی میدان دمایی در راکتور با چیدمانی بزرگ به کوچک بیشتر بوده و گرادیان‌های دمایی در این راکتور به مراتب کمتر از راکتور دیگر است. البته این امر به دلیل اثرات انسدادی بیشتر جریان در ورودی راکتور بزرگ به کوچک است که با افزایش نرخ واکنش در ورودی راکتور و همچنین ایجاد فرصت کافی برای اختلاط جریان سبب یکنواخت‌تر شدن جریان در پایین دست راکتور می‌شود. این یکنواختی در کانتورهای واکنش‌دهنده ایزوپروپانول که در شکل 19 نمایش داده شده‌اند نیز قابل مشاهده است. به طوری که گرادیان‌های کسر جرمی در درون راکتور یکنواخت‌تر بوده و واکنش‌دهنده و فرآورده‌ها به طور همگن‌تری راکتور را ترک می‌کنند که این امر از منظر فنی یک مزیت محسوب می‌شود. بیشترین کاهش محلی کسر جرمی واکنش‌دهنده در چیدمان کوچک به بزرگ رخ می‌دهد که دلیل آن نیز به گیر افتادن گردابه در پشت دو جسم بزرگ واقع در مرکز راکتور باز می‌گردد. وجود این گردابه‌ها فرصت بیشتری برای تبدیل واکنش‌دهنده به فرآورده را فراهم می‌آورد. بنابراین بیشترین مصرف کسر جرمی ایزوپروپانول (واکنش‌دهنده) در این نواحی رخ می‌دهد.



(b) (a)

Fig. 16 physical domain of same porosity 0.79 with a- specific area $0.56m^{-1}$ in small to large and b- large to small arrangements.

شکل 16 نمایی از هندسه‌های محیط متخلخل با ضریب تخلخل 0.79 و سطح مخصوص $0.56m^{-1}$ الف- کوچک به بزرگ و ب- بزرگ به کوچک

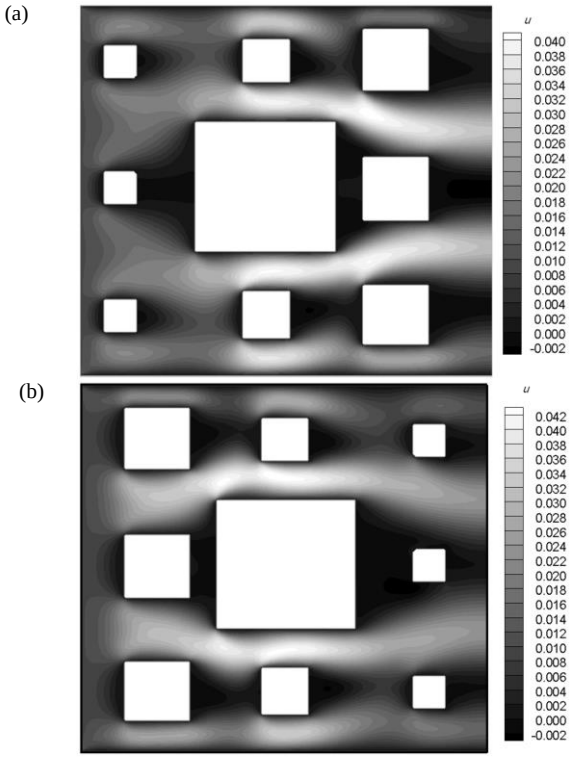


Fig. 17 X-component velocity (m/s) contour with specific area $0.56m^{-1}$ in a- small to large and b- large to small arrangements

شکل 17 نمایی از کانتورهای مؤلفه افقی سرعت (m/s) با سطح مخصوص $0.56m^{-1}$ الف- کوچک به بزرگ و ب- بزرگ به کوچک

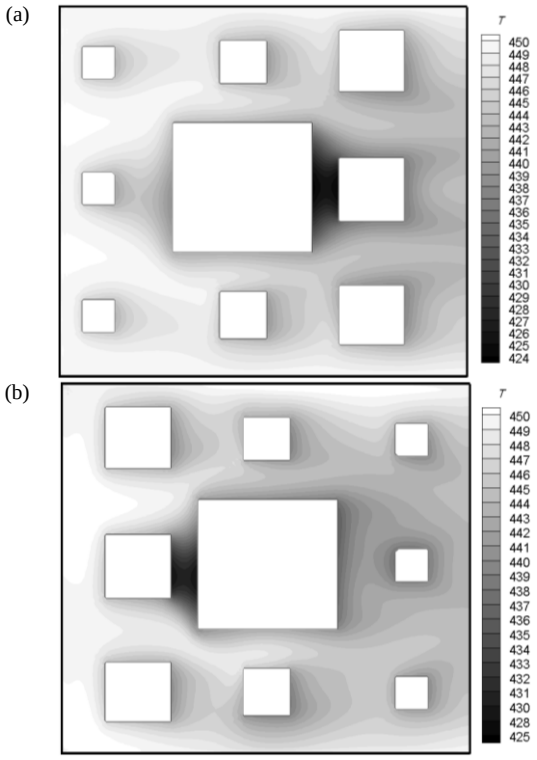


Fig. 18 Temperature (K) contour with specific area $0.56m^{-1}$ in a- small to large and b- large to small arrangements.

شکل 18 نمایی از کانتورهای دمایی (K) در محیط متخلخل با سطح مخصوص $0.56m^{-1}$ الف- کوچک به بزرگ و ب- بزرگ به کوچک

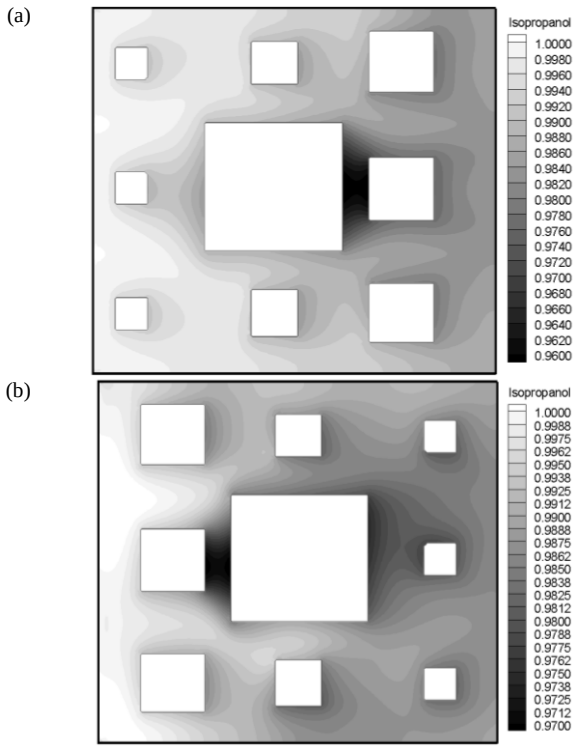


Fig. 19 Isopropanol mass fraction contour with specific area $0.56m^{-1}$ in a- small to large and b- large to small arrangements.

شکل 19 نمایی از کانتورهای دمایی در محیط متخلخل با سطح مخصوص $0.56m^{-1}$ الف- کوچک به بزرگ و ب- بزرگ به کوچک

به اختصار از بررسی این کانتورها می‌توان استنباط نمود که هر دو راکتور از منظر عملکردی تقریباً دارای راندمان یکسان هستند و تغییر نحوه چیدمان تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر عمکرد آن‌ها ندارد، اما از منظر همگن بودن جریان درون راکتور و همچنین همگن بودن جریان در خروجی راکتور می‌توان اعلام نمود که راکتور با چیدمانی بزرگ به کوچک دارای یکنواختی بهتری در اختلاط گونه‌های شیمیایی و حرارت دارد.

نمودار نسبت تبدیل واکنش‌دهنده به فرآورده در اعداد پکلت 5-25 در شکل 20 نمایش داده شده است. با توجه به نمودار اشاره شده می‌توان دریافت که نسبت تبدیل واکنش‌دهنده در هر دو راکتور در اعداد پکلت کم تقریباً برابر هستند و با افزایش عدد پکلت در نسبت تبدیل واکنش‌دهنده اندکی اختلاف مشاهده می‌شود که این نسبت در راکتور با چیدمان بزرگ به کوچک اندکی بیشتر از راکتور دیگر است. دلیل این امر نیز به اثرات انسدادی بیشتر در راکتور با چیدمان بزرگ به کوچک باز می‌گردد.

شکل 21 نیز نمودار افت فشار بدون بعد درون این دو راکتور را نسبت به تغییرات عدد رینولدز نمایش می‌دهد. با توجه به یکسان بودن اجزاء مورد استفاده در این دو راکتور، افت فشار درون آن‌ها نیز تقریباً یکسان است. تطابق خوبی میان افت فشار حاصل از شبیه‌سازی با افت فشار تخمین زده شده توسط رابطه کارمن-کوزینی مشاهده می‌شود. بیشینه اختلاف مشاهده شد میان نتایج حاصل از شبیه‌سازی صورت پذیرفته با نتایج حاصل از تخمین رابطه کارمن-کوزینی به 9% می‌رسد که به نحوی صحت نتایج شبیه‌سازی را تأیید می‌نماید. به منظور بررسی اثرات ضریب گذردهی نیز نمودار تغییرات ضریب گذردهی با تغییر عدد ربنوادز در شکل 22 نمایش داده شده است. با توجه به این نمودار می‌توان دریافت که تغییر عدد رینولدز تأثیر محسوسی بر ضریب گذردهی ندارد.

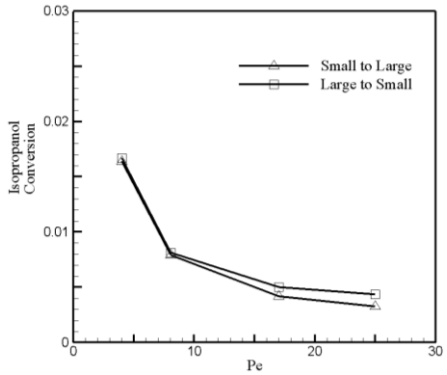


Fig. 20 Isopropanol conversion in respect to Pe_h variation from 4 to 25.

شکل 20 نمودار مقایسه‌ای نسبت تبدیل واکنش‌دهنده برای اعداد پکلت 4-25

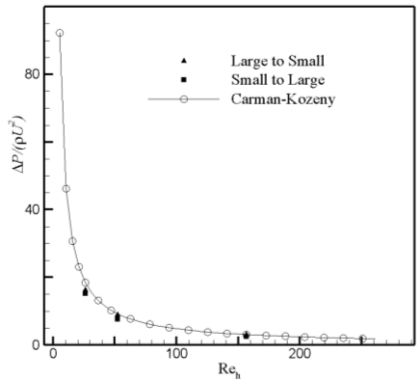


Fig. 21 Dimensionless pressure drop across packed bed reactor in respect to Re_h variation from 25 to 157.

شکل 21 نمودار مقایسه‌ای افت فشار بدون بعد برای اعداد رینولدز 25-157

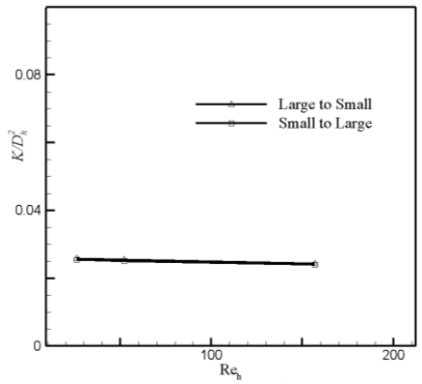


Fig. 22 Dimensionless permeability coefficient across packed bed reactor in respect to Re_h variation from 25 to 157

شکل 22 نمودار تغییرات ضریب گذردهی بدون بعد برای اعداد رینولدز 25-157

4- نتیجه‌گیری

با توجه به نتایج حاصل از شبیه‌سازی و مقایسه راکتورهایی با سطح مخصوص متفاوت و همچنین بررسی اثرات چیدمانی اجزاء تشکیل‌دهنده راکتورها در اعداد رینولدز مختلف می‌توان نتیجه‌گیری زیر را ارائه نمود.

1- اگر شرایط کارکرد راکتورها در اعداد رینوادز پایین باشد، عملکرد راکتور با سطح مخصوص بیشتر بسیار بهتر از سایر راکتورها خواهد بود، زیرا در این شرایط می‌توان به نسبت تبدیل بسیار بهتری با افت فشار کم دست یافت.

2- اگر شرایط کارکرد راکتورها در اعداد رینوادز بالا باشد، اختلاف قابل

ملاحظه‌ای در نسبت تبدیل حاصل از راکتورها مشاهده نمی‌شود؛ بنابراین با توجه به افت فشار کمتر ایجاد شده در راکتورهایی با سطح مخصوص کمتر پیشنهاد می‌شود تا از راکتوری با سطح مخصوص کمتر در این در این رژیم استفاده شود. همچنین برای کسب راندمان بالاتر توصیه می‌شود تا ترتیب چیدمانی اجزاء تشکیل‌دهنده راکتور از بزرگ به کوچک باشد تا علاوه‌بر افزایش نسبت تبدیل واکنش‌دهنده بتوان به جریانی یکنواخت‌تر در داخل و خروجی راکتور دست یافت.

5- مراجع

[1] H. Calis, J. Nijenhuis, B. Paikert, F. Dautzenberg, C. Van Den Bleek, CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing, *Chemical Engineering Science*, Vol. 56, No. 4, pp. 1713-1720, 2001.

[2] A. G. Dixon, M. Nijemeisland, E. H. Stitt, Packed tubular reactor modeling and catalyst design using computational fluid dynamics, *Advances in Chemical Engineering*, Vol. 31, No. 1, pp. 307-389, 2006.

[3] A. G. Dixon, M. E. Taskin, E. H. Stitt, M. Nijemeisland, 3D CFD simulations of steam reforming with resolved intraparticle reaction and gradients, *Chemical Engineering Science*, Vol. 62, No. 18, pp. 4963-4966, 2007.

[4] J. Yang, Q. Wang, M. Zeng, A. Nakayama, Computational study of forced convective heat transfer in structured packed beds with spherical or ellipsoidal particles, *Chemical Engineering Science*, Vol. 65, No. 2, pp. 726-738, 2010.

[5] X. Li, J. Cai, F. Xin, X. Huai, J. Guo, Lattice Boltzmann simulation of endothermal catalytic reaction in catalyst porous media, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 50, No. 1, pp. 1194-1200, 2013.

[6] X. Chen, J. Dai, Z. Luo, CFD modeling using heterogeneous reaction kinetics for catalytic dehydrogenation syngas reactions in a fixed-bed reactor, *Particuology*, Vol. 11, No. 6, pp. 703-714, 2013.

[7] Y. Duan, M. Xu, X. Zhou, X. Huai, A structured packed-bed reactor designed for exothermic hydrogenation of acetone, *Particuology*, Vol. 17, No. 1, pp. 125-130, 2014.

[8] X. Zhou, Y. Duan, X. Huai, X. Li, 3D CFD modeling of acetone hydrogenation in fixed bed reactor with spherical particles, *Particuology*, Vol. 11, No. 6, pp. 715-722, 2013.

[9] O. Filippova, D. Hänel, A novel lattice BGK approach for low Mach number combustion, *Computational Physics*, Vol. 158, No. 2, pp. 139-160, 2000.

[10] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook, A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems, *Physical Review*, Vol. 94, No. 3, pp. 511-525, 1954.

[11] R. Rioux, M. Vannice, Hydrogenation/dehydrogenation reactions: isopropanol dehydrogenation over copper catalysts, *Catalysis*, Vol. 216, No. 1, pp. 362-376, 2003.

[12] A. S. Foust, *Principles of Unit Operations*, 2nd ed., pp. 125-198: American Chemical Society, Wiley, 1981.

[13] A. Verruijt, Darcy's Law, *Theory of Groundwater Flow*, pp. 6-13, London: Macmillan Education UK, 1970.