

مقیاس گذاری هیدرودینامیک و ویژگی های اختلاط یک بسترسیال چرخشی شبه دوبعدی مرتبط با راکتورهای MTO: اعتبارسنجی تجربی و مطالعه CFD

مجتبی بابایی^۱، سلمان موحدی راد^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

۲- دانشیار مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

پیام نگار : movahedirad@iust.ac.ir

چکیده

در این پژوهش، رفتار هیدرودینامیکی یک بسترسیال چرخشی سرد شبه دوبعدی مرتبط با فرایند MTO در سه مقیاس هندسی مختلف به صورت تجربی و عددی بررسی شده است. برای اعتبارسنجی مدل، ابتدا داده های تجربی میدان سرعت و کسر حجمی فاز جامد با استفاده از تصویربرداری پرسرعت و روش PIV-DIA برداشت شد و مدل دوفازی اوپلری-اوپلری مبتنی بر KTGF در محیط OpenFOAM توسعه یافت. مقایسه نتایج نشان داد که مدل عددی قادر است بیشینه سرعت فاز جامد در ناحیه مرکزی را با اختلاف کمتر از ۱۰٪ و روند کاهش سرعت در نزدیکی دیواره ها را با دقت قابل قبولی بازتولید کند. پس از اعتبارسنجی، مدل برای سه مقیاس به کار گرفته شد و نتایج نشان داد با وجود افزایش ابعاد هندسی تا حدود ۲ برابر، ساختار کلی جریان شامل هسته صعودی مرکزی و نواحی نزولی مجاور دیواره ها در هر سه مقیاس حفظ شده و جابه جایی مکانی معناداری در این نواحی رخ نمی دهد. تحلیل کسر حجمی نیز نشان داد با افزایش مقیاس، تفاوت مقدار کسر حجمی بین مرکز و دیواره تا ۱۵٪ کاهش یافته و توزیع غلظت جامد در ناحیه مرکزی یکنواخت تر می شود. به منظور ارزیابی کمی اختلاط، شاخص CMI در سه مقیاس محاسبه گردید. نتایج نشان داد مقدار CMI در ناحیه مرکزی برای سه مقیاس در بازه ۰/۸۸ تا ۰/۹۴ قرار داشته و پراکندگی نسبی آن ها کمتر از ۵/۵٪ است که بیانگر عدم وابستگی معنی دار اختلاط به تغییر هندسه در محدوده ی بررسی شده می باشد. این نتایج نشان می دهد که مدل اعتبارسنجی شده می تواند برای تحلیل مقیاس گذاری و طراحی بسترهای سیال چرخشی فرآیند MTO قابل اتکا باشد و رفتار اختلاط و ساختار جریان در هندسه های بزرگ تر را بدون انحراف کیفی پیش بینی کند.

کلمات کلیدی: بسترسیال چرخشی، شبه دوبعدی، MTO، شبیه سازی اوپلری-اوپلری، KTGF، مقیاس گذاری هیدرودینامیکی، اختلاط فاز جامد، شاخص CMI، اعتبارسنجی تجربی.

فرآیند تبدیل متانول به الفین‌ها^۱ یکی از مهم‌ترین مسیرهای تبدیل گاز طبیعی و زغال سنگ به محصولات پتروشیمی با ارزش افزوده‌ی بالا، به‌ویژه اتیلن و پروپیلن، به شمار می‌آید. در سال‌های اخیر، این فرآیند در مقیاس صنعتی، به‌ویژه در چین، با موفقیت تجاری‌سازی شده و به‌عنوان جایگزینی برای مسیرهای متداول مبتنی بر نفت خام مطرح شده است [۱]. عملکرد واحدهای صنعتی MTO به‌شدت تحت تأثیر رفتار هیدرودینامیکی راکتورهای بسترسیال است؛ زیرا توزیع زمانی و مکانی فاز جامد، شدت اختلاط، الگوی حباب‌زایی و توزیع زمان اقامت کاتالیست، همگی تعیین‌کننده‌ی بازده، گزینش‌پذیری و نرخ تشکیل کک در بستر هستند [۲ و ۱]. در میان انواع پیکربندی‌های بسترسیال، بسترسیال چرخشی^۲ به دلیل قابلیت بالای گردش مداوم کاتالیست، کنترل بهتر دما و امکان جداسازی و احیای کاتالیست کک‌گرفته، گزینه‌ای شاخص برای فرآیند MTO است [۳ و ۲]. در این پیکربندی، جریان گاز-جامد در یک حلقه‌ی راکتور-استندپایپ-سیکلون گردش می‌کند و رفتار هیدرودینامیکی ناحیه‌ی چگال^۳ و ناحیه‌ی رقیق به‌صورت درهم‌تنیده، دینامیک کلی سیستم را شکل می‌دهد [۴]. در چنین شرایطی، پیش‌بینی دقیق الگوی جریان ذرات، رژیم سیال‌سازی، سرعت نسبی فازها و توزیع کسر حجمی جامد، برای طراحی مطمئن و مقیاس‌گذاری از پایلوت به صنعتی ضروری است.

از دیدگاه مدل‌سازی، طی دو دهه‌ی گذشته تلاش‌های قابل‌توجهی برای توسعه‌ی مدل‌های عددی جهت توصیف رفتار بسترهای سیال MTO انجام شده است. در کار سونداراراجان^۴ و همکاران [۲] فرآیند MTO در یک بسترسیال چرخشی با استفاده از مدل‌های شبه‌یک‌بعدی و موازنه‌های جرمی و انرژی مدل‌سازی شد و نشان داده شد که گردش کاتالیست و توزیع زمان اقامت ذرات نقش کلیدی در عملکرد راکتور دارند. در ادامه، با توسعه‌ی روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)، مدل‌های دوسیالی مبتنی بر نظریه جنبشی دانه‌ها (KTGF) برای شبیه‌سازی هم‌زمان هیدرودینامیک و واکنش در بسترهای سیال MTO به کار گرفته شدند. به‌عنوان نمونه، ژائو^۵ و همکاران [۳] یک مدل سه‌بعدی دوسیالی برای یک راکتور بزرگ‌مقیاس MTO ارائه کردند و نشان دادند که این مدل قادر است الگوهای کلی سرعت و توزیع فاز جامد را با دقت مناسبی بازتولید کند. باین‌وجود، شبیه‌سازی سه‌بعدی راکتورهای بزرگ‌مقیاس، هزینه‌ی محاسباتی بسیار بالایی دارد؛ به همین دلیل، لو^۶ و همکاران [۵ و ۵] با معرفی مدل‌های چندمقیاسی و کوپل کردن مدل‌های واکنشی ساده‌شده با حلگرهای CFD، روش‌هایی برای تسریع شبیه‌سازی راکتورهای MTO پیشنهاد کردند. این مطالعات نشان می‌دهند که یافتن تعادل بین دقت و هزینه‌ی محاسباتی، یکی از چالش‌های اصلی در مدل‌سازی راکتورهای بسترسیال چرخشی برای MTO است. در ادامه، ژانگ^۷ و همکاران [۷] با تمرکز بر توزیع کک در بسترسیال MTO نشان دادند که ناهمگنی هیدرودینامیکی، به‌ویژه در مقیاس‌های بزرگ، می‌تواند منجر به توزیع غیریکنواخت کک و در نتیجه تفاوت قابل توجه بین پیش‌بینی‌های عددی و داده‌های تجربی در مقیاس صنعتی شود.

در سال‌های اخیر، نسل جدیدی از مطالعات CFD به‌صورت اختصاصی روی راکتورهای صنعتی و تجاری MTO متمرکز شده‌اند. وان^۸ و همکاران [۸] با استفاده از یک مدل سه‌بعدی دوسیالی، رفتار هیدرودینامیکی یک راکتور صنعتی MTO را در مقیاس تجاری

^۱ Methanol-to-Olefins, MTO

^۲ Circulating Fluidized Bed, CFB

^۳ dense bed

^۴ Soundararajan

^۵ Zhao

^۶ Lu

^۷ Zhang

^۸ Wan

شبیه‌سازی کرده و نشان داده‌اند که درک کامل برهم‌کنش بین جریان گاز-جامد، تولید گرما و واکنش، برای جلوگیری از نقاط داغ و حفظ گزینش‌پذیری الفین‌ها حیاتی است. علاوه بر این، ژانگ و همکاران با شبیه‌سازی واکنشی یک راکتور صنعتی MTO، بر اهمیت کوپل دقیق بین زیردامنه‌ی واکنشی و هیدرودینامیکی تأکید کرده‌اند و نشان داده‌اند که ساده‌سازی بیش از حد بخش هیدرودینامیک، می‌تواند به خطاهای قابل توجه در پیش‌بینی تبدیل و گزینش‌پذیری منجر شود [۹]. با وجود این پیشرفت‌ها، بخش عمده‌ی این مطالعات به راکتورهای سه‌بعدی با هندسه‌ی صنعتی، مدل‌های واکنشی پیچیده و تحلیل عملکرد کل راکتور اختصاص دارد؛ در نتیجه، هیدرودینامیک ناحیه‌ی چگال و رفتار اختلاط در بسترهای سرد شبه دو بعدی که می‌توانند به‌عنوان مدل ساده‌شده‌ی برش‌های صفحه‌ای راکتورهای صنعتی در نظر گرفته شوند، کمتر به‌صورت نظام‌مند و با داده‌های تجربی پر جزئیات بررسی شده‌اند. از سوی دیگر، بسیاری از تحلیل‌های پیشین یا تنها روی یک مقیاس هندسی متمرکز بوده‌اند، یا اثر مقیاس را با فرضیات ساده‌کننده و بدون اعتبارسنجی دقیق عددی-تجربی بررسی کرده‌اند [۵،۶،۷،۱۰].

در زمینه‌ی داده‌های تجربی، استفاده از سامانه‌های آزمون سرد و شفاف به همراه روش‌های تصویربرداری پیشرفته و آنالیز دیجیتال تصویر (PIV-DIA^۱) امکان اندازه‌گیری مستقیم میدان سرعت و کسر حجمی فاز جامد را فراهم کرده است. ژوانگ^۳ و همکاران [۱۰] با بهره‌گیری از مدل‌های ترکیبی CFD-DEM و داده‌های آزمایشگاهی، جریان گاز-جامد و واکنش MTO را در یک راکتور بسترسیال مطالعه کردند و نشان دادند که ناهمگنی‌های محلی در توزیع جامدات می‌تواند بر نرخ واکنش تأثیر قابل توجهی داشته باشد. باین‌حال، ترکیب داده‌های تجربی مبتنی بر PIV-DIA در یک سامانه‌ی سرد شبه دو بعدی با مدل‌های دوسیالی اعتبارسنجی شده، و سپس استفاده از این مدل برای بررسی اثر مقیاس هندسی بر رفتار هیدرودینامیکی و شاخص‌های اختلاط، هنوز به‌صورت محدود گزارش شده است.

از سوی دیگر، بررسی‌های مروری اخیر نشان می‌دهند که گرچه طیف وسیعی از مدل‌های سینتیکی و هیدرودینامیکی برای فرآیند MTO توسعه یافته است، اما پیوند نظام‌مند بین تحلیل هیدرودینامیک در مقیاس آزمایشگاهی و مقیاس صنعتی همچنان یک چالش باز است. فتاحی و همکاران در یک مرور جامع بر مدل‌سازی واکنش و احیای فرآیند MTO، اشاره کرده‌اند که توسعه‌ی مدل‌های مقیاس‌پذیر نیازمند چارچوبی است که در آن، هیدرودینامیک با داده‌های تجربی معتبر در مقیاس آزمایشگاهی اعتبارسنجی شده و سپس در مقیاس‌های بزرگ‌تر تعمیم یابد [۱۱]. در همین راستا، صدیقی و محمدی با استفاده از CFD، رفتار راکتور بسترسیال MTO را شبیه‌سازی کرده و نشان داده‌اند که انتخاب مناسب مدل پسا و پارامترهای KTGF نقش تعیین‌کننده‌ای در صحت پیش‌بینی الگوهای جریان دارد [۱۲]. در مطالعه غلامی و همکاران (۲۰۲۴) [۱۳]، الگوی جریان گاز-جامد در یک بسترسیال حبابی سرد مرتبط با فرآیند متانول به اولفین‌ها (MTO) به‌صورت عددی بررسی شد و با استفاده از مدل اوپلری-اوپلری مبتنی بر نظریه جنبشی جریان دانه‌ای، رفتار هیدرودینامیکی فاز جامد تحلیل گردید. نتایج این پژوهش نشان داد که نوع صفحه توزیع‌کننده گاز نقش تعیین‌کننده‌ای در توزیع فاز جامد، میزان اختلاط معکوس و الگوی جریان در ناحیه چگال بستر دارد و اعتبارسنجی مدل CFD با داده‌های آزمایشگاهی، قابلیت پیش‌بینی آن را تأیید می‌کند. در این میان، بسترهای سیال چرخشی سرد شبه دو بعدی می‌توانند به‌عنوان پلی بین مطالعات سه‌بعدی صنعتی و آزمایش‌های کوچک مقیاس عمل کنند. در یک کار اخیر، موحدی و بابایی هیدرودینامیک یک بسترسیال چرخشی سرد شبه دو بعدی^۴، متناظر با فرآیند MTO را با ترکیب تکنیک PIV-DIA و مدل دوسیالی در OpenFOAM

^۱ Particle Image Velocimetry-Digital Image Analysis

^۳ Zhuang

^۴ pseudo-2D

بررسی کرده و نشان داده‌اند که این نوع سامانه‌ها امکان مشاهده‌ی مستقیم حوزه‌های کم اختلاط و تحلیل اثر هندسه‌های داخلی (مانند بافل) بر رفتار اختلاط را فراهم می‌سازند [۱۴].

در این پژوهش، به چالش اصلی تعمیم رفتار هیدرودینامیکی بسترسیمال چرخشی از مقیاس آزمایشگاهی به راکتور صنعتی MTO پرداخته می‌شود؛ درحالی‌که مطالعات قبلی هم اغلب مستقیماً سراغ مقیاس صنعتی رفته‌اند و هم معمولاً فاقد مدل عددی معتبر و مقایسه‌ی نظام‌مند بین چند مقیاس هندسی بوده‌اند. در این کار، ابتدا یک بسترسیمال چرخشی سرد شبه دوبعدی بر اساس قیود فرایند DMTO ساخته و با روش PIV-DIA داده‌های تجربی سرعت و کسر حجمی جامد برداشت می‌شود. سپس یک مدل دوسیمالی مبتنی بر نظریه جنبشی دانه‌ها در OpenFOAM توسعه و در مقیاس آزمایشگاهی اعتبارسنجی می‌شود و در ادامه برای سه مقیاس مختلف به کار می‌رود تا توزیع سرعت، کسر حجمی جامد و شاخص اختلاط CMI مقایسه شود. هدف اصلی، بررسی این است که آیا هسته اختلاط و الگوی کلی جریان با افزایش مقیاس حفظ می‌شود یا نه، تا بدین ترتیب شکاف میان مطالعات سرد آزمایشگاهی و طراحی راکتورهای صنعتی MTO پر شود.

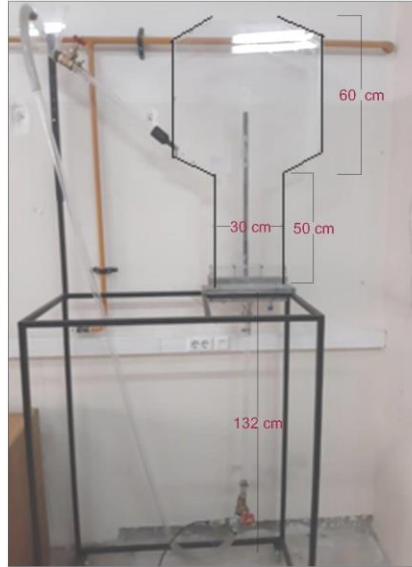
۲- سامانه آزمایشگاهی

به‌منظور فراهم کردن داده‌های تجربی قابل اتکا برای اعتبارسنجی مدل عددی، یک سامانه آزمایشگاهی شبه دوبعدی مطابق با اصول طراحی فرایند DMTO ساخته شد. طراحی این سامانه بر اساس مجموعه‌ای از قیود عملیاتی و هیدرودینامیکی انجام شد که شامل الزامات مربوط به زمان تماس گاز-جامد، زمان اقامت ذرات، محدوده^۱ WHSV و رفتار گردش جامدات در بسترهای صنعتی MTO است. هدف اصلی این طراحی، ایجاد بستری بود که بتواند الگوی جریان چگال راکتورهای صنعتی را در شرایط سرد بازتولید کرده و در عین حال امکان برداشت داده‌های دقیق تصویری را فراهم کند.

۲-۱ ساختار هندسی سامانه آزمایشگاهی

ساختار سامانه مورد استفاده در این مطالعه شامل یک راکتور شفاف از جنس پلکسی‌گلس با مقطع مستطیلی با طول ۳۰ سانتی‌متر و عرض ۲ سانتی‌متر است. این عرض محدود موجب می‌شود بستر به‌صورت شبه‌دوبعدی عمل کرده و امکان مشاهده مستقیم و دقیق حرکت ذرات فراهم شود که در شکل ۱ نشان داده شده است. طراحی هندسی سامانه بر اساس سه اصل کلیدی انجام شده است. نخست، بازتولید رفتار هیدرودینامیکی ناحیه چگال در بسترسیمال چرخشی فرایند MTO؛ به این منظور ارتفاع ناحیه واکنش به‌گونه‌ای تعیین شد که تشکیل رژیم حبابی پایدار و الگوی صعود-نزول جامدات به‌درستی برقرار شود. دوم، فراهم کردن امکان گردش پیوسته ذرات، مشابه آنچه در واحدهای صنعتی مشاهده می‌شود؛ برای این کار یک استندپایپ سه‌تکه همراه با دریچه‌های کنترلی در کنار بستر قرار داده شد تا مسیر بازگشت ذرات از ناحیه فوقانی به بخش پایینی سامانه برقرار باشد، رویکردی که الگوی جریان چرخشی در راکتورهای CFB صنعتی را شبیه‌سازی می‌کند. سوم، ایجاد شرایط یکنواخت برای تغذیه گاز؛ بدین منظور یک محفظه توزیع گاز و صفحه توزیع‌کننده در بخش پایینی بستر نصب شد تا سرعت ورودی گاز یکنواخت شده و از نوسانات موضعی جریان جلوگیری گردد.

^۱ Weight Hourly Space Velocity



شکل ۱- سامانه آزمایشگاهی طراحی شده

Figure 1. Schematic of the designed laboratory setup

۲-۲ خواص ذرات و شرایط عملیاتی

در این پژوهش از ذرات پلی استایرن در یک مدل سرد استفاده شد تا امکان اندازه گیری های نوری با تکنیک PIV-DIA فراهم گردد. هدف، بازتولید جنس واقعی کاتالیست MTO نبوده، بلکه ایجاد شباهت هیدرودینامیکی با راکتور صنعتی بوده است. در واحدهای پایلوت MTO بستر در رژیم حبابی عمل می کند؛ بنابراین سرعت گاز به گونه ای انتخاب شد که نسبت متناظر با همین رژیم حاصل شود و ساختارهای مشخص آن شامل تشکیل حباب، گردش مرکزی ذرات و نواحی نزولی نزدیک دیواره مطالعه گردد. از این رو، نتایج حاضر به عنوان یک مدل سرد هیدرودینامیکی قابل قیاس با رفتار جریان در پایلوت صنعتی در نظر گرفته می شود، هر چند شباهت ماده ای بین ذرات آزمایشگاهی و کاتالیست واقعی مدنظر نبوده است. بر این اساس، به منظور شبیه سازی رفتار هیدرودینامیکی مشابه با بسترهای چگال صنعتی، از ذرات پلی استایرن منبسط شده (EPS^۱) با قطر متوسط ۹۲۰ میکرومتر و دانسیته ۱۰۹۵ kg/m^3 استفاده شد. این ذرات در گروه B گلداریت قرار می گیرند و از آستانه سیال شدن وارد رژیم حبابی می شوند. کمینه سرعت سیالیت برای این ذرات برابر با ۳۷ سانتی متر بر ثانیه است. بنابراین انتخاب آن ها برای بازنمایی رفتار بسترسیال فرآیند MTO مناسب است. دو مقدار سرعت گاز $۰/۷۵ \text{ m/s}$ و ۱ m/s به عنوان سرعت های نماینده برای بررسی رفتار رژیم حبابی در اعتبارسنجی مدل انتخاب شد. این محدوده با طراحی های DMTO همخوانی داشته و از ایجاد جریان های شدیداً آشفته یا ناپایدار جلوگیری می کند.

۳-۲ روش برداشت داده و پردازش تصویری

برای استخراج داده های مورد نیاز جهت اعتبارسنجی مدل عددی، از ترکیب تکنیک های سرعت سنجی تصویری ذرات و آنالیز دیجیتال تصویر استفاده شد. تصاویر خام توسط یک دوربین پرسرعت با نرخ ۱۲۰ fps برداشت و سپس تحت فرآیندهای اصلاح نور، افزایش کنتراست و کاهش نویز قرار گرفتند. در مرحله تحلیل سرعت، تصاویر به سلول های ۶۴×۶۴ پیکسلی با ۵۰% همپوشانی تقسیم شدند

^۱ Expanded Polystyrene

و با استفاده از روش همبستگی متقاطع^۱، میدان سرعت لحظه‌ای استخراج شد. از آن جایی که حضور حباب‌ها در تصاویر می‌تواند به تولید بردارهای سرعت غیرواقعی منجر شود، پیش از اجرای الگوریتم PIV از ماسک‌گذاری دوتایی^۲ بهره گرفته شد تا نواحی فاقد ذره حذف شوند. میدان‌های سرعت لحظه‌ای در بازه حداقل ۱۸۰ ثانیه میانگین‌گیری شده و میدان سرعت پایدار به دست آمد. برای محاسبه کسر حجمی فاز جامد، تصاویر در دو حالت مرجع بستر خالی و بستر ثابت برداشت شده و بر اساس روش گراسا-آبانادس^۳، شدت خاکستری هر پیکسل به مقدار کسر حجمی متناظر تبدیل شد [۱۵]. سپس با میانگین‌گیری زمانی، توزیع پایدار کسر حجمی در دو ارتفاع مشخص از بستر (دو ارتفاع بدون بعد ۰/۲ و ۰/۴) تعیین شد.

۳- مدل سازی

۳-۱ معادلات حاکم

در این مطالعه، مدل سازی جریان گاز-جامد بر اساس چارچوب چندفازی اویلری-اویلری^۴ انجام شده است که در آن، فازهای گاز و جامد هر دو به صورت محیط پیوسته در نظر گرفته می‌شوند و برای هر فاز، معادلات بقا شامل پیوستگی، تکانه و برای فاز جامد معادله انرژی دانه‌ای حل می‌گردد. این مدل مبتنی بر نظریه جنبشی دانه‌ها (KTGF^۵) است که امکان محاسبه دمای دانه‌ای، لزجت مؤثر و نرخ اتلاف برخوردی ذرات را فراهم می‌سازد و در شبیه‌سازی بسترهای چگال و حبابی به طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است. معادله پیوستگی برای هر فاز k (گاز یا جامد) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k) + \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k) = 0 \quad (1)$$

که در آن α_k ، ρ_k و u_k به ترتیب کسر حجمی، چگالی و بردار سرعت فاز k هستند. معادله تکانه فاز گاز به صورت زیر بیان می‌شود.

$$\nabla \cdot (\alpha_g \rho_g u_g u_g) + \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g u_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot (\tau_g \alpha_g) + \alpha_g \rho_g g + \beta (u_s - u_g) \quad (2)$$

که در آن p فشار مشترک دو فاز، τ_g تنش ویسکوز فاز گاز، و β ضریب برهم‌کنش تکانه بین‌فازی (نیروی پسا) است. معادله تکانه فاز جامد نیز مشابه بوده اما با در نظر گرفتن تنش دانه‌ای فاز جامد نوشته می‌شود.

$$\nabla \cdot (\alpha_s \rho_s u_s u_s) + \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s u_s) = -\alpha_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot (\tau_s \alpha_s) + \alpha_s \rho_s g + \beta (u_g - u_s) \quad (3)$$

در روابط فوق، τ_s تانسور تنش مؤثر فاز جامد است که سهم گرانیوی برشی و حجمی محاسبه شده بر پایه KTGF را شامل می‌شود. انرژی دانه‌ای که بیانگر شدت نوسانات ذرات جامد است، نقش مهمی در تعیین فشار دانه‌ای و گرانیوی مؤثر دارد و با معادله انتقال زیر توصیف می‌شود.

$$\frac{3}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \theta) + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s u_s \theta) \right) = (\tau_s - p_s I) : \nabla u_s + \nabla \cdot (f_s \nabla \theta) + J_{vis} + J_{slip} - \gamma_s \quad (4)$$

که در آن θ دمای دانه‌ای، γ_s نرخ اتلاف انرژی برخوردی، و f_s رسانندگی مؤثر انرژی دانه‌ای است. فشار دانه‌ای و تنش‌های مؤثر جامد به ترتیب از روابط زیر محاسبه می‌شوند:

^۱ cross-correlation

^۲ Binary Masking

^۳ Grasa-Abanades

^۴ Eulerian-Eulerian

^۵ kinetic theory of granular flow (KTGF)

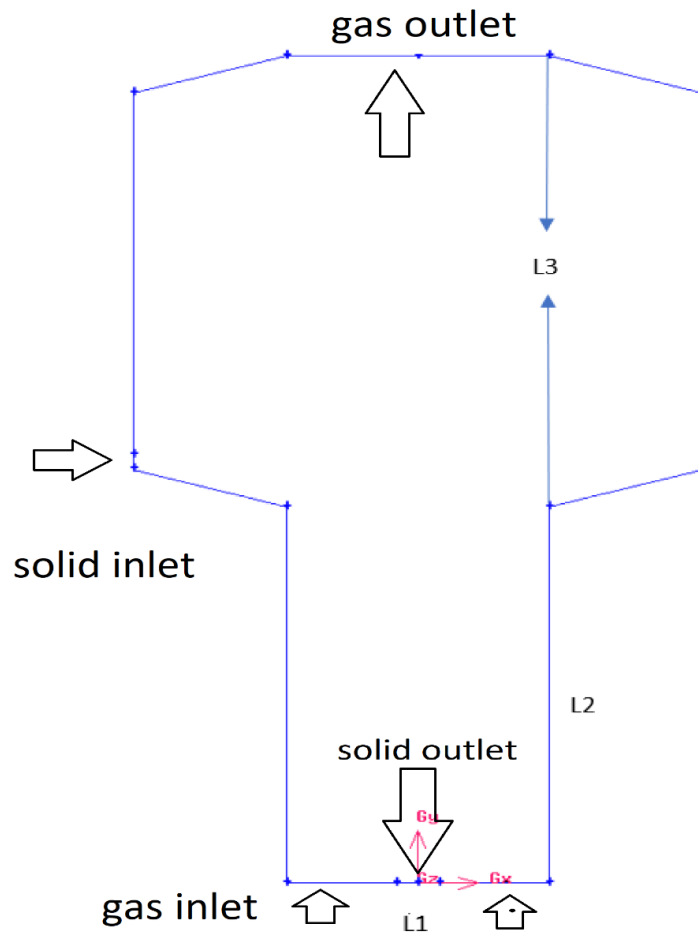
$$p_s = \rho_s \alpha_s \theta + 2\alpha_s^2 g_0 \theta (1 + e_s) \quad (5)$$

$$\tau_s = \mu_s (\nabla u_s + \nabla^T u_s) + \left(\lambda_s - \frac{2}{3}\mu_s\right) (\nabla \cdot u_s) I \quad (6)$$

در این روابط، e_s ضریب بازگشت برخوردی، g_0 تابع تراکم^۱، μ_s لزجت برشی و λ_s لزجت حجمی فاز جامد هستند که از روابط کلاسیک KTGF استخراج می‌شوند. مجموعه معادلات (۱) تا (۶) تشکیل‌دهنده چارچوب ریاضی مدل اویلری-اویلری در این مطالعه است و حل هم‌زمان آن‌ها رفتار هیدرودینامیکی بستر را در سه مقیاس هندسی ممکن می‌سازد.

۲-۳ هندسه شبیه‌سازی

هندسه مورد استفاده در شبیه‌سازی، متناظر با سامانه آزمایشگاهی معرفی‌شده، شکل ۱، است و شامل یک ناحیه مستطیلی شبه دویعدی برای بستر اصلی می‌باشد که در شکل ۲ نشان داده شده است. برای بررسی اثر مقیاس هندسی، سه هندسه مختلف (Sc1، Sc2 و Sc3) با ابعاد خطی افزایش‌یافته در نظر گرفته شده است؛ به‌گونه‌ای که نسبت‌های هندسی بین ارتفاع بستر، ارتفاع استندپایپ و طول ناحیه ته‌نشینی در هر سه مقیاس ثابت حفظ شود، اما تعداد سلول‌ها و بار محاسباتی به‌صورت قابل ملاحظه افزایش یابد.



شکل ۲- شماتیک هندسه بستر، شرایط مرزی و تعریف طول‌های مشخصه

Figure 2. Schematic of the geometry, applied boundary conditions, and definition of characteristic lengths

^۱ radial distribution function

مقادیر ابعاد نشان داده شده شکل ۲، در مقیاس‌های مورد بررسی، در جدول ۱ ارائه شده است.

جدول ۱- ابعاد سه مقیاس شبیه‌سازی

Table 1. Geometric dimensions at the three simulation scales

نام مقیاس/ابعاد	Sc. 1	Sc. 2	Sc. 3
L1	30	60	15
L2	50	100	25
L3	60	120	30

ویژگی‌های مربوط به شبکه محاسباتی هر یک از مقیاس‌ها در جدول ۲ نشان داده شده است. این جدول نشان می‌دهد که افزایش مقیاس منجر به افزایش قابل توجه تعداد نقاط شبکه، سطوح داخلی و سلول‌ها می‌شود.

جدول ۲- ویژگی‌های عددی شبکه‌ها (مقیاس ۱ الی ۳)

Table 2. Numerical characteristics of the computational grids (Scales 1-3)

Scale / Feature	Sc.1	Sc.2	Sc.3
Nodes	28,426	126,874	7,120
Faces	55,972	372,736	13,801
Internal Faces	27,548	165,374	6,683
Cells	13,920	103,100	3,414

شبکه محاسباتی به صورت ساخت یافته و عمدتاً چهارضلعی تولید شده و با ریزکردن در نواحی نزدیک دیواره و اطراف صفحه توزیع کننده، امکان تفکیک بهتر گرادیان‌های سرعت و کسر حجمی فراهم شده است. برای اطمینان از سلامت نتایج، مطالعه استقلال از شبکه با استفاده از سه سطح مختلف ریزشده می‌شود انجام شده است که نتایج آن در بخش بعدی ارائه خواهد شد.

۳-۳ شرایط شبیه سازی

شرایط مرزی در شبیه‌سازی‌ها در جدول ۳ گزارش شده است. در دیواره‌های بستر، برای فاز گاز شرط عدم لغزش و برای فاز جامد مدل تماس دیواره جانسون-جکسون با لغزش محدود^۱ و ضریب زبری مشخص اعمال شده است. در ورودی گاز، سرعت یکنواخت با مقدار ثابت (0.75 m/s در اعتبارسنجی و 0.5 m/s در افزایش مقیاس) در نظر گرفته شده و برای خروجی گاز، شرط فشار ثابت با گرادیان صفر سرعت اتخاذ شده است. برای فاز جامد، ورودی و خروجی بر اساس دبی جرمی ثابت و کسر حجمی اولیه ذرات تنظیم شده و شرط جریان جرمی ورودی، خروجی برای جامد اعمال گردیده است. دمای دانه‌ای در مرزها نیز مطابق مدل جانسون-جکسون با ترکیبی از شرط بازتاب برخوردی و گرادیان صفر تنظیم شده است.

^۱ Johnson-Jackson partial-slip wall condition

جدول ۳- شرایط مرزی مورد استفاده در شبیه‌سازی CFD

Table 3. Boundary conditions applied in the CFD simulations

No	Boundary		Gas Phase	Solid Phase	α	θ (Granular Temperature)
1	Walls	No-slip	Johnson–Jackson particle slip		Zero gradient	Johnson–Jackson model Restitution coefficient: 0.95 Specularity coefficient: 0.2
2	Gas Inlet	Fixed value (0.5 m/s and 0.75 m/s)	Uniform fixed value		Zero gradient	Uniform fixed value (1.0×10^{-4})
3	Gas Outlet	pressureInletOutletVelocity	Uniform fixed value		Zero gradient	Zero gradient
4	Solid Inlet	pressureInletOutletVelocity	Uniform fixed value (2.4 g/s)		Uniform fixed value (0.63)	massFlowInlet
5	Solid Outlet	pressureInletOutletVelocity	Uniform fixed value (2.4 g/s)		Uniform fixed value (0.63)	massFlowOutlet

۳-۴ روش حل

شبیه‌سازی‌ها با استفاده از محیط OpenFOAM و حلگر چندفازی twoPhaseEulerFoam انجام شده است که برای حل هم‌زمان معادلات پیوستگی، تکانه و دمای دانه‌ای دو فاز گاز و جامد توسعه یافته است. گسسته‌سازی ترم‌های جابجایی به صورت مرتبه دوم مکانی و با استفاده از طرح‌های پایدار TVD انجام شده و گسسته‌سازی زمانی نیز به صورت ضمی و مرتبه دوم در نظر گرفته شده است. گام زمانی اولیه به گونه‌ای انتخاب شده که عدد کورانت کمتر از حدود ۰/۳ باقی بماند و در طول شبیه‌سازی به صورت خودکار تنظیم می‌شود تا ضمن حفظ پایداری، زمان محاسباتی در حد معقول باقی بماند. شبیه‌سازی‌ها تا رسیدن به وضعیت شبه‌پایدار ادامه یافته و سپس، مقادیر زمانی میانگین گرفته شده برای استخراج پروفیل‌های سرعت و کسر حجمی در سه مقیاس مختلف مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

۳-۵ محاسبه شاخص اختلاط

به منظور ارزیابی کمی کیفیت اختلاط فاز جامد در هر سه مقیاس هندسی، از شاخص اختلاط مبتنی بر پراکندگی کسر حجمی CMI^1 استفاده شد [۱۶، ۱۷ و ۱۸]. برای محاسبه شاخص یکنواختی هسته ابتدا دامنه محاسبه تعیین می‌گردد، پیش فرض اصلی برای حذف اثرات دیواره، در ارتفاع بدون بعد ۰/۴، حذف ۱۰٪ از هر طرف می‌باشد. بنابراین شاخص بدست آمده نمایانگر ۸۰٪ مرکزی بستر می‌باشد. با افزایش فاصله از دیواره‌ها شاخص اختلاط یکنواختی ۷۰٪ و ۶۰٪ نیز قابل محاسبه خواهد بود. برای محاسبه CMI ابتدا میانگین کسر حجمی متوسط زمانی در دامنه محاسبه خواهد شد [۱۷].

¹ Cluster Mixing Index

$$\bar{\alpha}_s = \frac{1}{L} \int_{x \in L} \alpha_s(x) dx \quad (7)$$

سپس واریانس کسر حجمی بر اساس رابطه زیر قابل محاسبه خواهد بود [۱۷].

$$\sigma_s^2 = \frac{1}{L} \int_{x \in L} (\alpha_s(x) - \bar{\alpha}_s)^2 dx \quad (8)$$

در نهایت CMI بر اساس رابطه زیر قابل محاسبه خواهد بود. همانگونه که از تعریف قابل مشاهده است. این شاخص رابطه معکوس با ضریب تغییرات کسر حجمی CV دارد.

$$CMI_\beta = 1 - \frac{\sigma_s}{\bar{\alpha}_s} \quad (9)$$

هر چقدر CMI به عدد یک نزدیک تر باشد اختلاط بصورت یکنواخت تری انجام شده است. اختلاف کمتر از ۱۰٪ شاخص در مقیاس‌های مختلف می‌تواند مؤید عدم وابستگی اختلاط به شکل هندسی سیستم باشد.

۴-بحث و نتایج

۴-۱ بررسی استقلال نتایج از شبکه

برای بررسی دقت شبیه‌سازی‌ها، سه شبکه‌ی محاسباتی مختلف تولید گردید. مشخصات کیفی این شبکه‌ها، شامل نوع المان‌ها و روش مش‌زنی، در جدول ۴ ارائه شده است و ویژگی‌های کمی آن‌ها از جمله تعداد نقاط، وجوه و سلول‌ها در جدول ۵ گزارش شده است.

جدول ۴- مشخصات هندسی شبکه‌ها و نوع المان‌های به‌کاررفته

Table 4. Geometric characteristics of the computational meshes and types of elements

Case	Face 1	Face 2	Face 3
Sc. 1	1782	660	1500
	Elements: Quad, Type: Map, Interval size=2		Elements: map, Type: Map, Interval size=1
Sc. 2	1782	2038	3396
	Elements: Quad, Type: Map, Interval size=2		Elements: Triangle, Type: Pave, Interval size=1
Sc. 3	1782	1320	3000
	Elements: Quad, Type: Map, Interval size=2		Elements: Triangle, Type: Mapsplit, Interval size=1

در فرآیند مش‌زنی سه صفحه‌ی اصلی که در ۳۰ نمایش داده شده در نظر گرفته شد. صفحه‌ی نخست مربوط به ناحیه‌ای در بالای بستر است که در آن کسر حجمی فاز جامد پایین بوده و تغییرات دینامیکی ناچیزی رخ می‌دهد؛ از این رو، در هر سه شبکه اندازه‌ی مش در این صفحه ثابت انتخاب شد زیرا اثر قابل توجهی بر نتایج نهایی ندارد. در مقابل، صفحات دوم و سوم دامنه‌ی فعال سیستم را پوشش می‌دهند؛ نواحی‌ای که در آن‌ها کسر حجمی جامد بالا بوده و فرآیند ورود و خروج ذرات اتفاق می‌افتد. این بخش‌ها در مقیاس صنعتی نیز به‌طور رایج به‌عنوان «ناحیه‌ی فعال» شناخته می‌شوند و به همین دلیل، دقت و ریزش‌دگی شبکه در این صفحات اهمیت

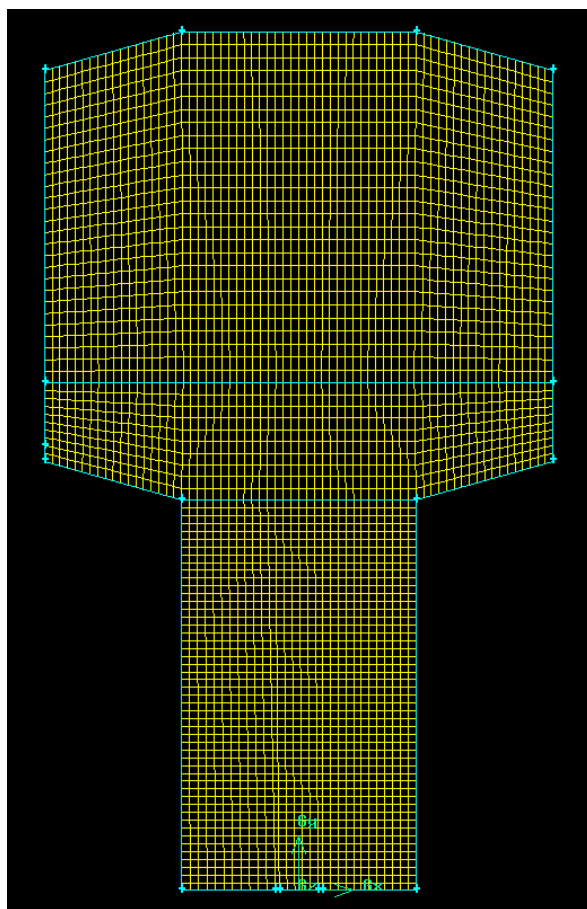
بیشتری دارد. در واقع تفاوت اصلی میان سه شبکه‌ی مورد بررسی دقیقاً به مش‌زنی همین صفحات دوم و سوم مربوط می‌شود که میزان ریزش‌دگی و نحوه‌ی تقسیم‌بندی آن‌ها در شبکه ۱ الی ۳ متفاوت در نظر گرفته شد.

جدول ۵- ویژگی‌های عددی شبکه‌ها

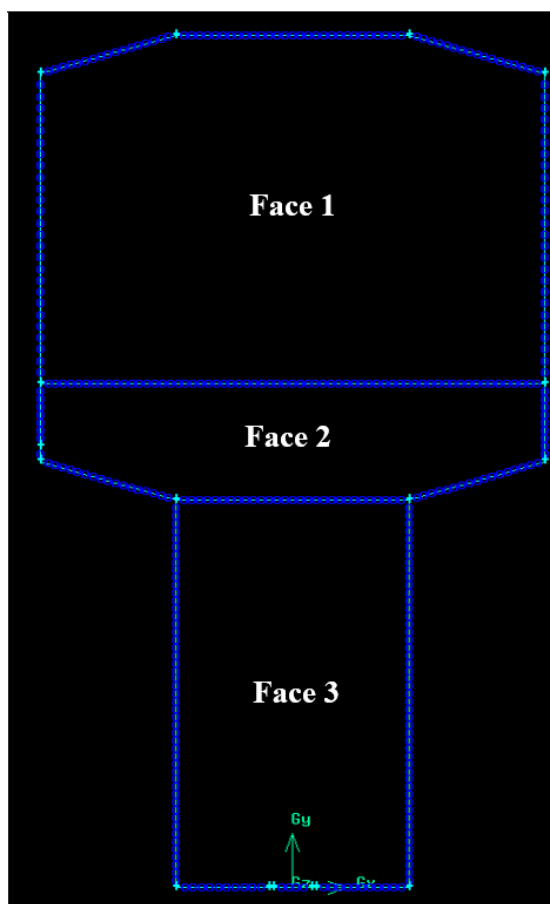
Table 5. Numerical characteristics of the computational meshes

Feature	Mesh 1	Mesh 2	Mesh 3
Nodes	8,192	9,306	8,588
Faces	15,921	26,300	23,787
Internal Faces	7,731	11,562	10,485
Cells	3,942	7,216	6,498

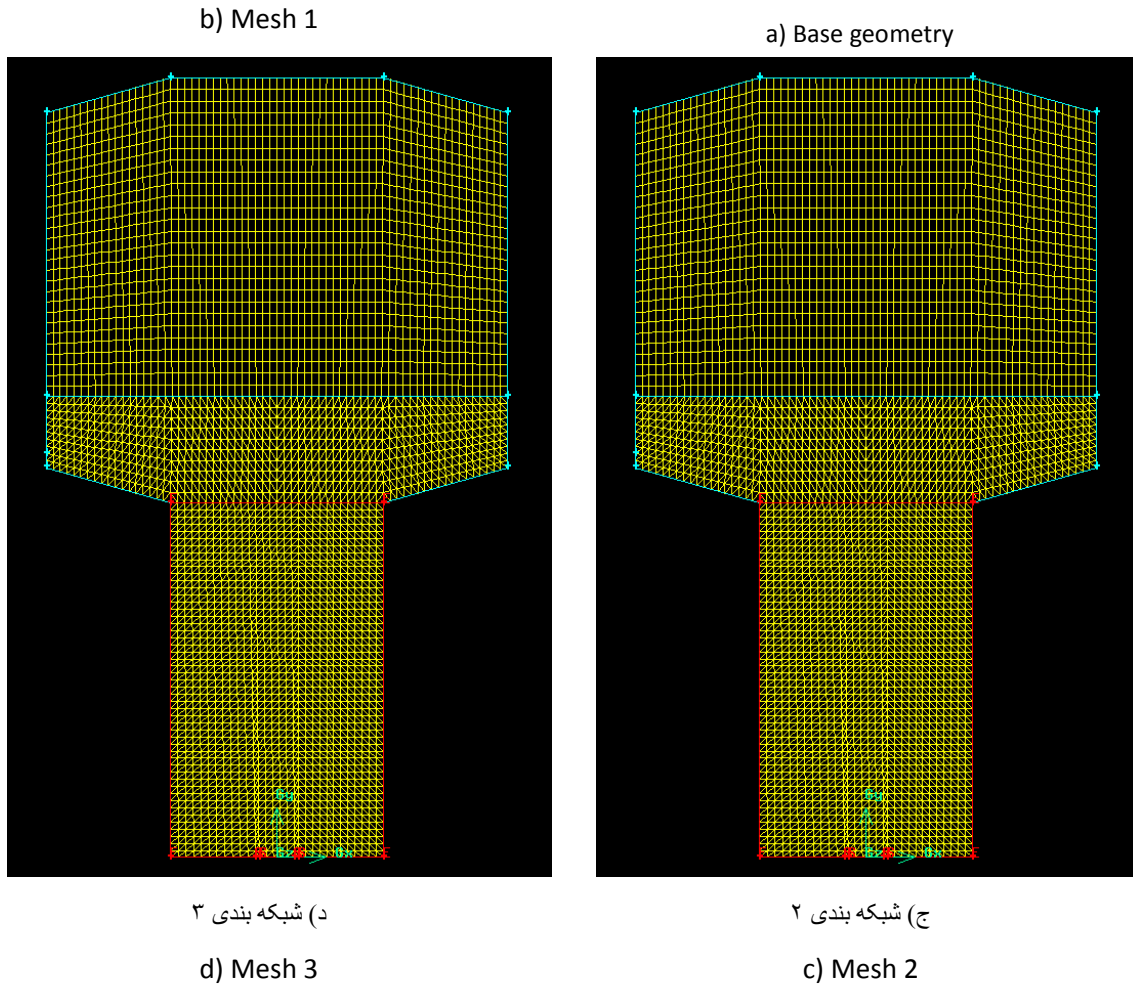
همان‌طور که از داده‌های جدول ۴ و جدول ۵ و مقایسه با شکل ۰ مشخص است، سه شبکه‌ی مورد بررسی از نظر تعداد سلول‌ها و نوع المان‌ها تفاوت قابل توجهی دارند. شبکه‌ی اول با تعداد سلول کمتر و تراکم پایین‌تر، ساختاری ساده‌تر داشته و انتظار می‌رود در بازسازی گرادینان‌های موضعی دقت کمتری داشته باشد. شبکه‌ی دوم با افزایش تعداد سلول‌ها و ریزش‌دگی بیشتر در نواحی حساس نزدیک دیواره، توزیع متعادل‌تری ارائه کرده است. در نهایت، شبکه‌ی سوم اگرچه ریزتر از شبکه اول طراحی شده، اما از نظر تراکم و ترکیب المان‌ها اختلاف چندانی با شبکه دوم ندارد و ساختار آن بیشتر به‌عنوان یک شبکه‌ی تکمیلی قابل مقایسه است.



(ب) شبکه بندی ۱



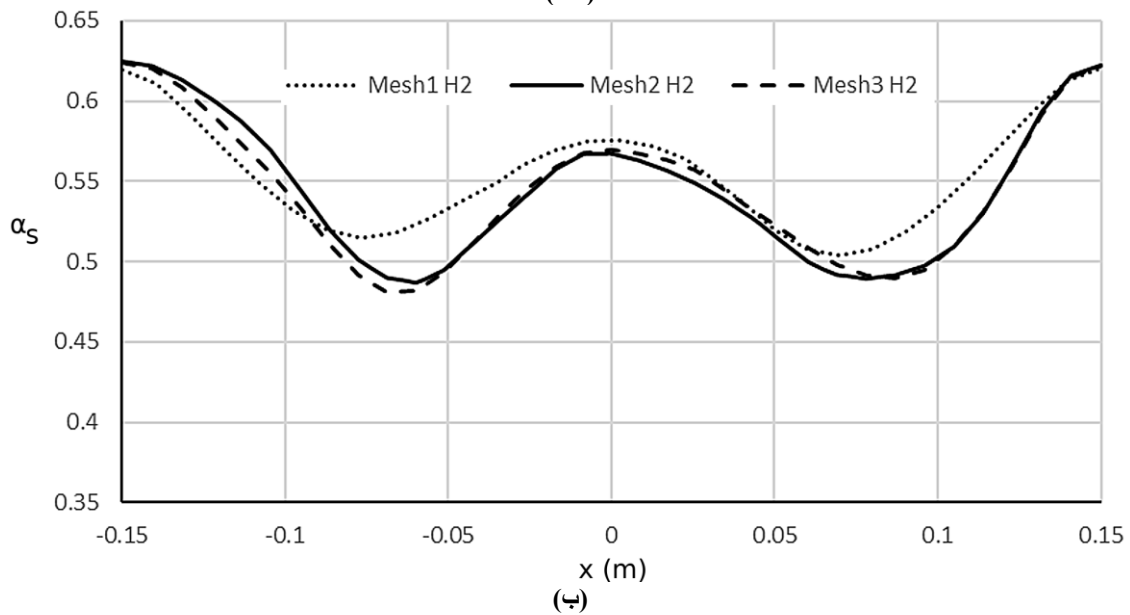
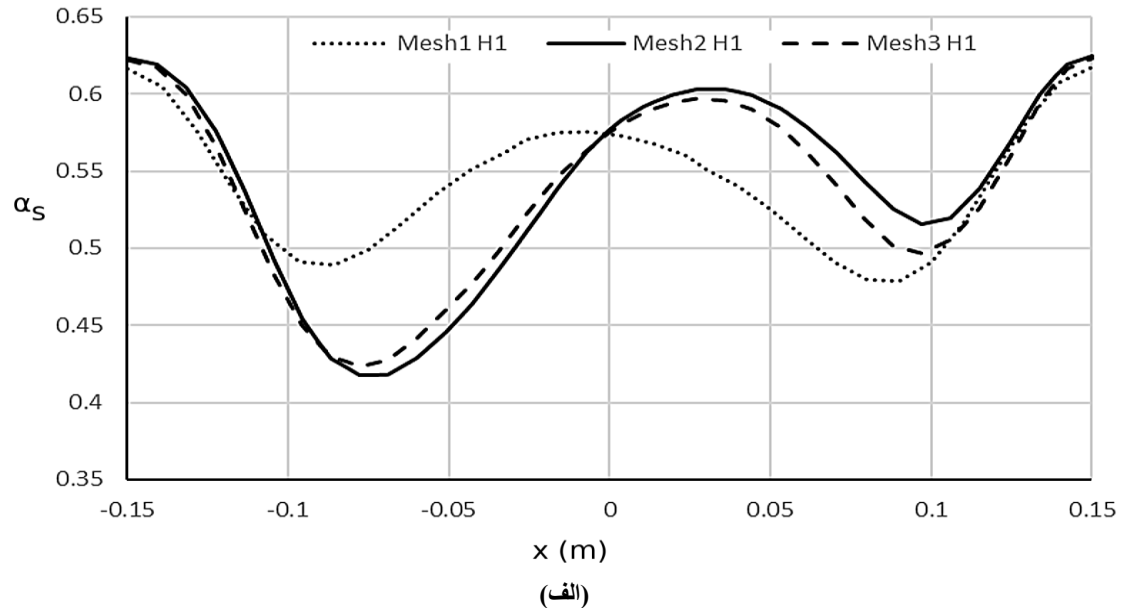
(الف) هندسه پایه



شکل ۳- شماتیک شبکه‌ها

Figure 3. Schematic of the computational meshes

برای استقلال نتایج از شبکه، شبیه سازی ها در سرعت سیال سازی 0.5 m/s انجام شد؛ این سرعت بالاتر از سرعت مینیمم حباب سازی و متناظر با زمان تماس گاز-جامد برابر با 0.5 ثانیه است. افزون بر این، انتخاب سرعت میانی 0.5 m/s نسبت به سرعت‌های بالاتر (0.75 m/s و 1 m/s) با کاهش شدت آشفتگی، دامنه‌ی کم تر نوسانات فشار و میزان انبساط بستر، پایداری عددی را بهبود داده و گام‌های زمانی بزرگ‌تر و تعداد گام محاسباتی کمتری را ممکن می‌سازد؛ بنابراین هزینه محاسباتی برای مطالعه حساسیت شبکه به‌طور معناداری کمتر می‌شود، درحالی‌که ماهیت هیدرودینامیکی مورد نظر حفظ می‌گردد.



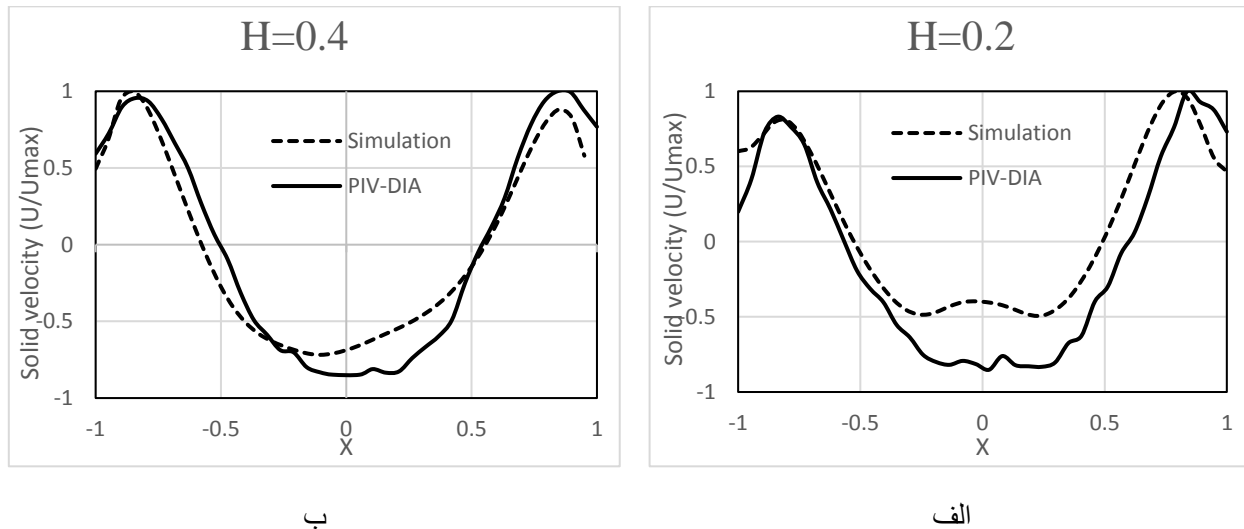
شکل ۴-مقایسه کسر حجمی متوسط فاز جامد در دو ارتفاع بدون بعد الف) $H_1=0.2$ و ب) $H_2=0.4$ برای سه شبکه مختلف، سرعت سیال سازی 0.5 m/s

Figure 4. Comparison of the averaged solid phase volume fraction at two dimensionless heights, (a) $H_1 = 0.2$ and (b) $H_2 = 0.4$, for three computational meshes at a fluidization velocity of 0.5 m/s

پس از این مقایسه‌ی هندسی و عددی، برای ارزیابی دقیق‌تر عملکرد شبکه‌ها، نتایج توزیع کسر حجمی متوسط فاز جامد در ارتفاع‌های بدون بعد ۰.۲ و ۰.۴ ستون استخراج و در شکل ۴ ارائه شد. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، شبکه‌ی اول نتایج متفاوتی نسبت به دو شبکه‌ی دیگر نشان داده و تغییرات مکانی کسر حجمی در آن هموارتر و کم‌دقت‌تر بازسازی شده است. در مقابل، شبکه‌ی دوم و سوم روندی تقریباً مشابه ارائه داده‌اند، به‌گونه‌ای که اختلاف میان آن‌ها در محدوده‌ای قرار دارد که از نظر مهندسی قابل چشم‌پوشی است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که افزایش بیشتر تراکم شبکه از شبکه ۲ به شبکه ۳ بهبود معناداری در نتایج ایجاد نکرده و شبکه ۲ با تعادلی مناسب میان دقت و هزینه‌ی محاسباتی به‌عنوان گزینه‌ی نهایی برای ادامه‌ی شبیه‌سازی‌ها انتخاب گردید. با توجه به استخراج مستقیم شاخص اختلاط از میدان کسر حجمی فاز جامد، نمودارهای کسر حجمی در مقاطع و نواحی مرجع، به تنهایی قابلیت نمایندگی هیدرودینامیک سیستم و بررسی سنجش حساسیت نتایج به شبکه را دارا بود.

۴-۲ اعتبارسنجی مدل عددی

برای بررسی دقت مدل عددی، نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی حاصل از تکنیک PIV-DIA مقایسه گردید. مبنای این مقایسه توزیع سرعت میانگین عمودی ذرات در دو ارتفاع بدون بعد ۰.۲ و ۰.۴ در سرعت سیال سازی گاز برابر با ۰.۷۵ متر بر ثانیه بستر بود. داده‌های تجربی از طریق تصویربرداری پرسرعت و پردازش دیجیتال استخراج شد و نتایج عددی با استفاده از مدل دو سیاله اوپلری- اوپلری محاسبه گردید. مطابق با شکل ۵، مدل عددی این مطالعه قادر است بیشینه سرعت فاز جامد در ناحیه مرکزی را با اختلاف کمتر از ۱۰٪ ($RMSE=0/05$) و روند کاهش سرعت در نزدیکی دیواره‌ها را با دقت قابل قبولی بازتولید کند [۱۳ و ۱۴].



شکل ۵- میانگین سرعت جامد از شبیه‌سازی و PIV-DIA در بخش پایینی بستر در سرعت ۰.۷۵ m/s [۱۳ و ۱۴]

Figure 5. Comparison of the averaged solid velocity from CFD simulations and PIV-DIA experiments at fluidization velocity of 0.75 m/s in the lower region of the bed [13,14]

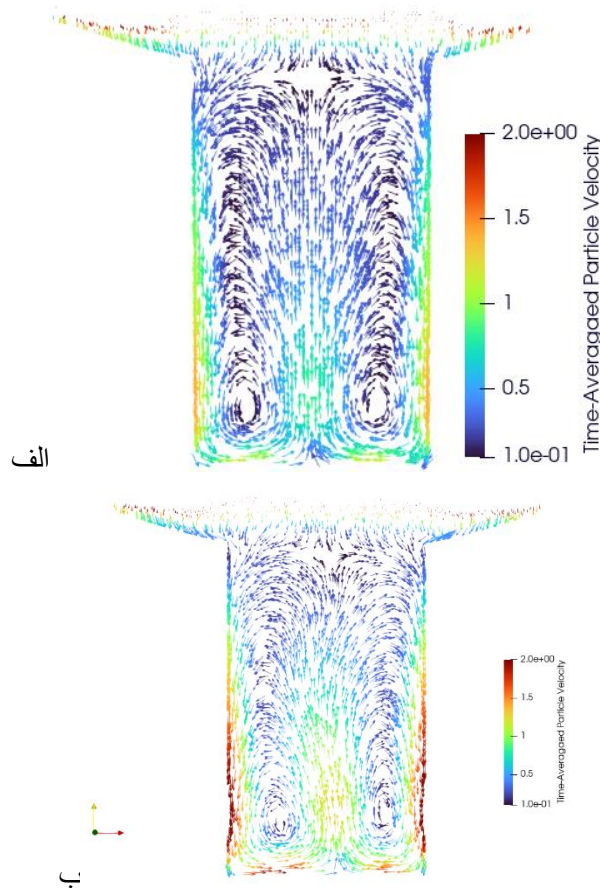
۳-۴ شبیه سازی در سه مقیاس

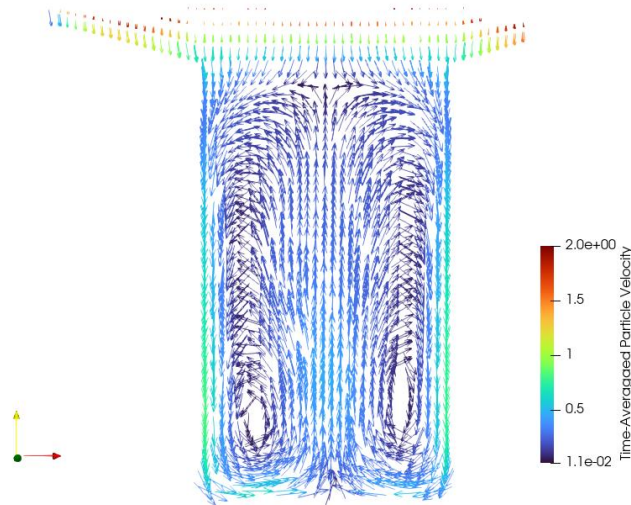
در این بخش، با هدف سنجش پایداری و تعمیم‌پذیری نتایج نسبت به تغییر اندازه هندسی، سه مقیاس معرفی شده در جدول ۱، ارزیابی می‌شوند. ابتدا میدان سرعت فاز جامد و سپس میدان کسر حجمی جامدات گزارش و مقایسه می‌گردد تا رفتار بخش مرکزی یکنواخت و لایه‌های برشی پیرامونی در مقیاس‌های مختلف به صورت شفاف سنجیده شود. در ادامه، برای تفکیک روندهای مقطعی و ارتفاعی، نیمرخ‌های عرضی سرعت و کسر حجمی در دو ارتفاع بدون بعد نماینده از ناحیه میانی بستر (ارتفاع‌های بدون بعد ۰/۲ و ۰/۴) ترسیم می‌شود.

به منظور جداسازی اثر خالص هندسه و تضمین مقایسه هم‌شرط، سرعت‌های سطحی گاز و جامد در مرزهای ورودی در هر سه مقیاس برابر مقیاس مبنا در نظر گرفته شد. بدین ترتیب نسبت U_g/U_{mf} ، و نیز گروه‌های بدون بعد ذره محور نظیر Re_p و Fr_p (با طول ذره مرجع d_p) ثابت می‌مانند و فلاکس ذرات جامد (شار جرمی بر واحد سطح) تغییر نمی‌کند. بنابراین تفاوت‌های مشاهده شده در تحلیل‌های بعدی صرفاً به تغییر هندسه نسبت داده می‌شود. در پایان، برای قضاوت کمی و قابل مقایسه بین مقیاسی درباره یکنواختی اختلاط هسته‌ای، شاخص میدان محور CMI به عنوان یک شاخص کلیدی بدون بعد محاسبه و تفسیر خواهد شد.

۳-۴-۱ میدان سرعت فاز جامد

شکل ۶ میدان سرعت متوسط زمانی فاز جامد در سه مقیاس را نشان می‌دهد. الگوی کلی جریان بین مقیاس‌ها تقریباً یکسان است چرا که، ناحیه مرکزی با تغییرات آرام‌تر و نواحی با گرادیان بالاتر در مجاورت دیواره‌ها در هر سه مورد دیده می‌شود. علاوه بر این مقایسه سه میدان سرعت نشان می‌دهد محل‌های برجسته گرادیان (نزدیک دیواره‌ها) و نحوه گذار از ناحیه مرکزی به حاشیه، با تغییر اندازه هندسی جابه‌جایی معناداری ندارد.



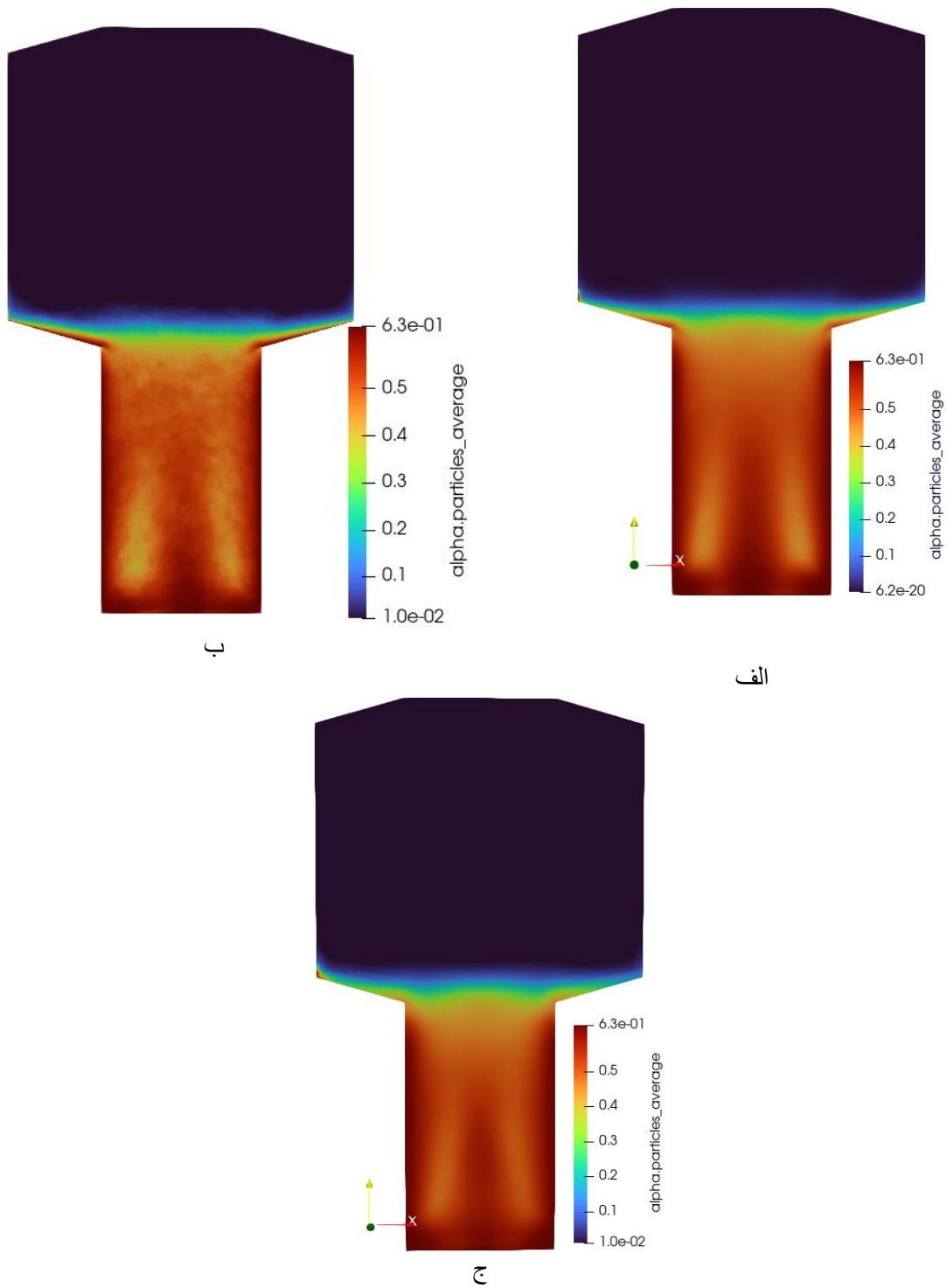


شکل ۶- الگوی میانگین جریان جامد از شبیه‌سازی برای سه مقیاس در سرعت 0.5 m/s (الف) مقیاس Sc.1، (ب) مقیاس Sc.2، (ج) مقیاس Sc.3

Figure 6. Time-averaged solid phase flow structures predicted by the simulations at a fluidization velocity of 0.5 m/s for three scales: (a) Scale 1, (b) Scale 2, and (c) Scale 3

۲-۳-۴ کسر حجمی متوسط فاز جامد

نمودار میدان کسر حجمی متوسط زمانی فاز جامد در شکل ۷ نشان داده شده است. در هر سه مقیاس یک ناحیه مرکزی یکنواخت‌تر و نواحی گذار به سمت دیواره‌ها مشاهده می‌شود. وقتی عرض را بدون بعد می‌کنیم، نواحی با مقدار زیاد و کم تقریباً در همان مکان‌های قبلی ظاهر می‌شوند و شکل خطوط هم‌مقدار در هر سه مقیاس مشابه است. تفاوت‌ها عمدتاً به شدت تغییرات محلی مربوط است (مثلاً شیب تندتر یا ملایم‌تر نزدیک دیواره)، نه به جایگاه نواحی یا الگوی کلی توزیع. هم‌خوانی نقشه‌های با نقشه‌های سرعت، شواهد سازگاری رفتار هیدرودینامیکی در سه مقیاس را تکمیل می‌کند.

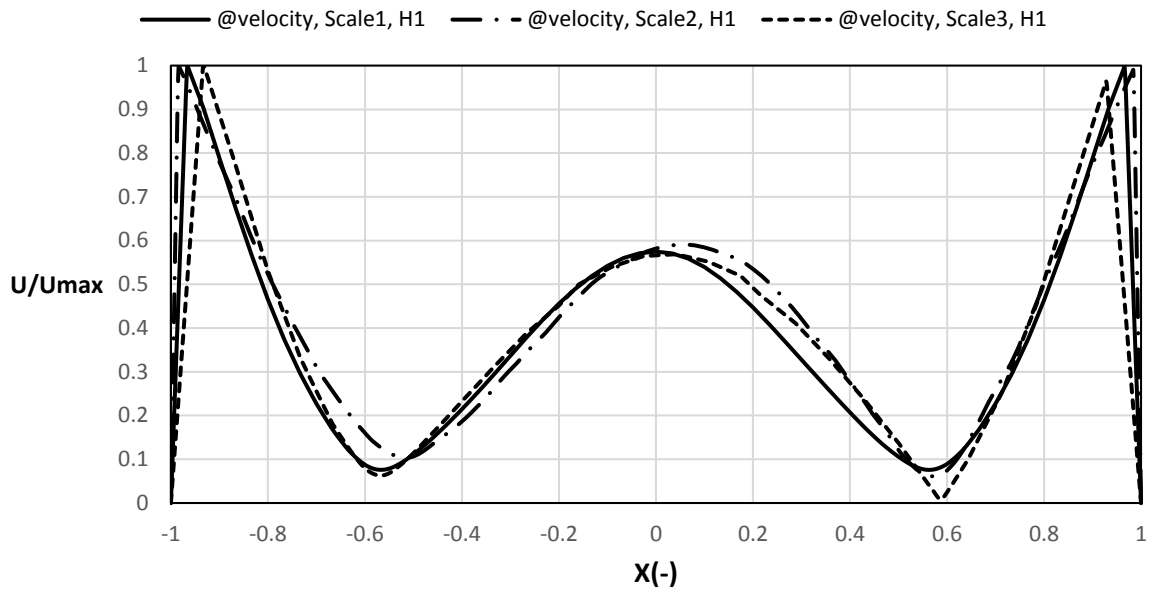


شکل ۷- میدان میانگین کسر حجمی فاز جامد برای سه مقیاس در سرعت 0.5 m/s (الف) مقیاس Sc.1، (ب) مقیاس Sc.2، (ج) مقیاس Sc.3

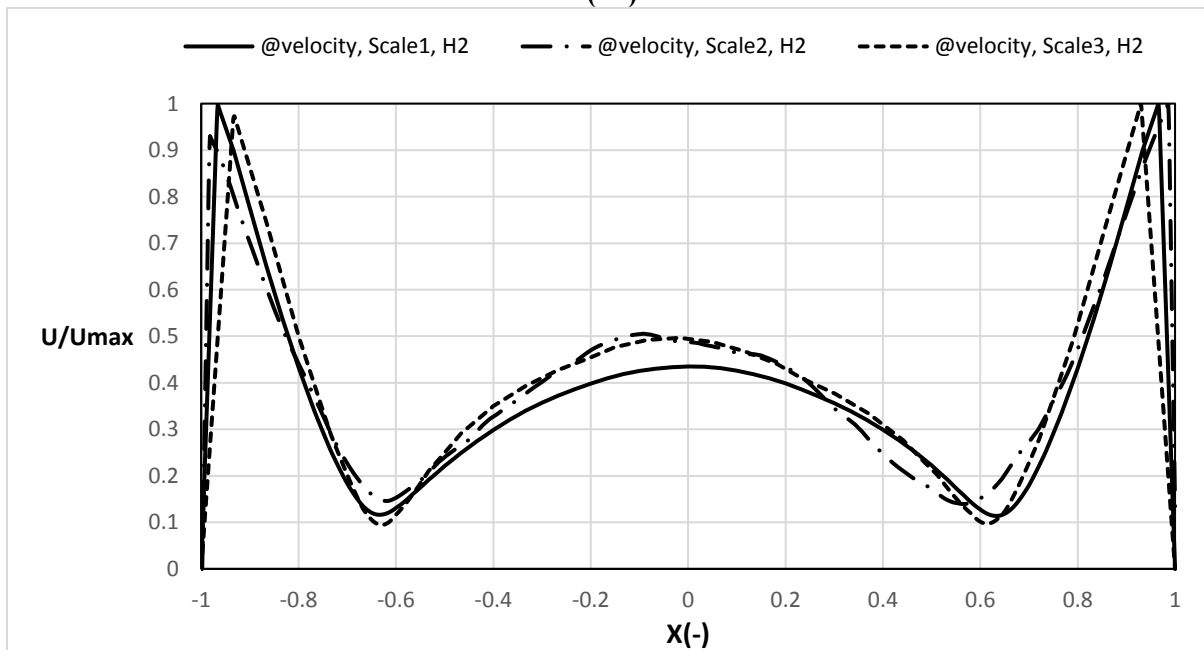
Figure 7. Time-averaged solid phase volume fraction fields at a fluidization velocity of 0.5 m/s for the three scales: (a) Sc.1, (b) Sc.2, and (c) Sc.3

۳-۳-۴ نیمرخ سرعت میانگین فاز جامد

نیمرخ‌های سرعت متوسط زمانی فاز جامد بدون بعد (U/U_{max}) در دو ارتفاع بدون بعد در میانه ناحیه فعال بستر در شکل ۸ نشان داده شده است. مقایسه سه مقیاس در هر ارتفاع نشان می‌دهد شکل نیمرخ‌ها مشابه است و تفاوت‌ها، محدود به جزئیات موضعی می‌باشد. همچنین تفاوت بین دو ارتفاع برای هر مقیاس با همان الگو در دو مقیاس دیگر تکرار می‌شود؛ یعنی هر تغییری که با ارتفاع در یک مقیاس دیده می‌شود، در دو مقیاس دیگر نیز به همان جهت رخ می‌دهد. این هم‌جهتی نشان می‌دهد اثر ارتفاع و اثر اندازه هندسی روی توزیع عرضی سرعت از یک قاعده شکلی مشترک تبعیت می‌کنند.



(الف)



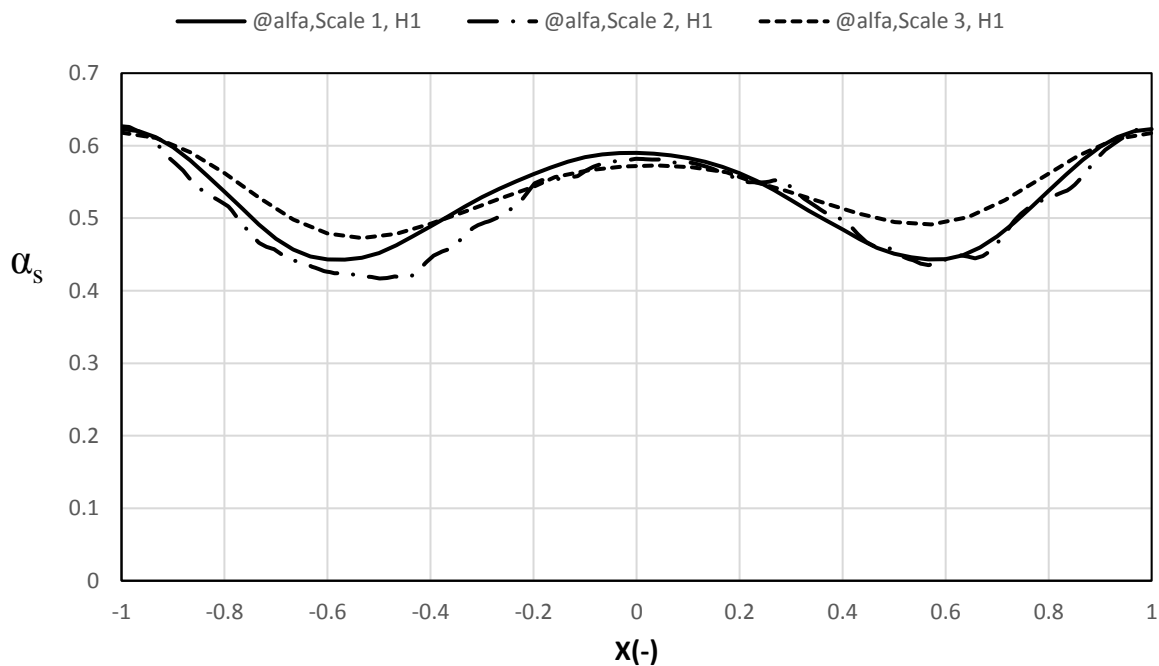
(ب)

شکل ۸- نمودار سرعت بدون بعد فاز جامد بر حسب طول بدون بعد به ازای سرعت سیال سازی 0.5 m/s در سه مقیاس و ارتفاع بدون بعد الف) 0.2 و ب) 0.4

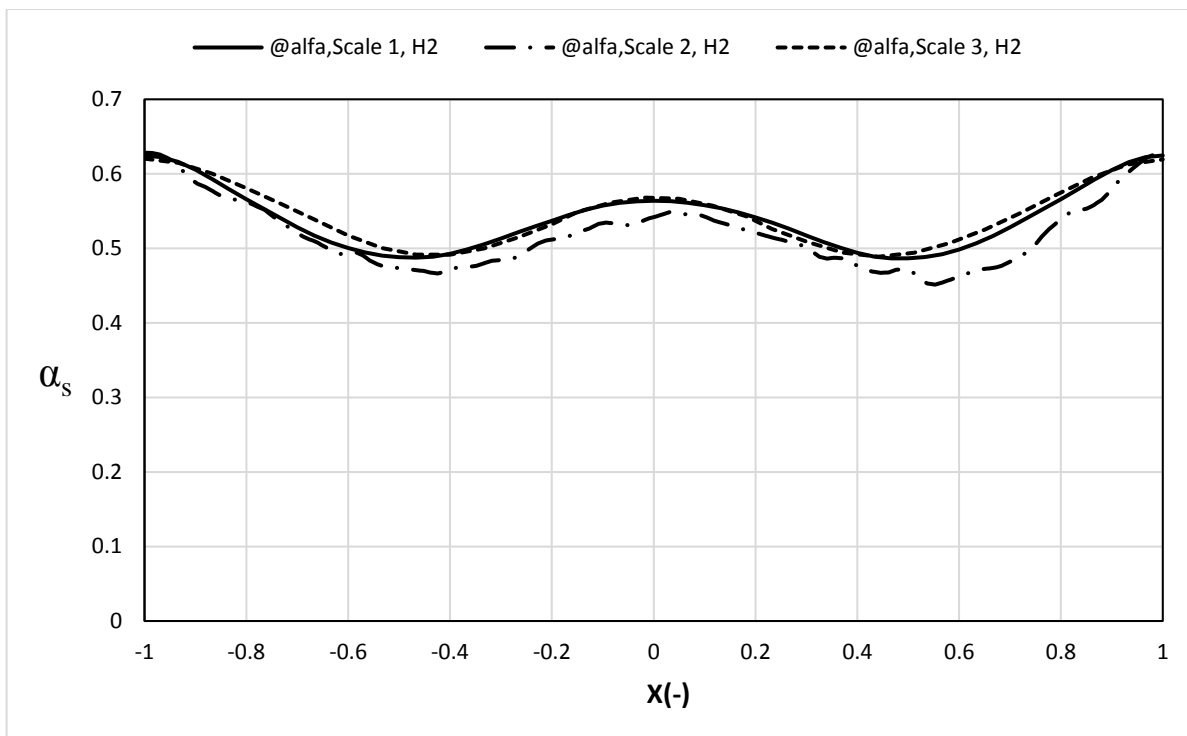
Figure 8. Profiles of the dimensionless solid phase velocity versus dimensionless length at a fluidization velocity of 0.5 m/s for three scales at two dimensionless heights: (a) $H = 0.2$ and (b) $H = 0.4$

۴-۳-۴ نیمرخ کسر حجمی متوسط فاز جامد

در شکل ۹ نیمرخ‌های میانگین کسر حجمی فاز جامد بر اساس ارتفاع بدون بعد برای سه مقیاس ترسیم شده است. در همه مقیاس ها و در هر دو ارتفاع، یک بخش مرکزی یکنواخت تر و نواحی گذار به سمت دیواره بازتولید شده است. تشابه نیمرخ مربوط به مقیاس‌های مختلف روی محور بدون بعد نشان می‌دهد بخش مرکزی و الگوی گذار در هر ارتفاع رفتار یکسانی دارد. تفاوت‌های مشاهده شده محدود به نواحی نزدیک دیواره‌هاست. مقایسه دو ارتفاع نیز نشان می‌دهد تغییرات با ارتفاع، در هر سه مقیاس با روندی هم‌سو رخ می‌دهد؛ بنابراین، اثر ارتفاع روی توزیع عرضی کسر حجمی فاز جامد تحت تغییر اندازه هندسی رفتار مشابهی دارد.



(الف)



(ب)

شکل ۹- نمودار کسر حجمی جامد بر حسب طول بدون بعد در سه مقیاس در دو ارتفاع بدون بعد الف) ارتفاع $H=0.2$ و ب) $H=0.4$
 Figure 9. Profiles of the solid phase volume fraction versus dimensionless length for three scales at two dimensionless heights: (a) $H = 0.2$ and (b) $H = 0.4$

۴-۳-۵ شاخص اختلاط میدان فاز جامد

مقادیر شاخص اختلاط میدان محور CMI برای سه مقیاس در جدول ۶ گزارش شده است. نتایج نشان می‌دهد هر سه مقدار در بازه‌ای بسیار نزدیک قرار می‌گیرند و پراکندگی نسبی آن‌ها (اختلاف بیشینه و کمینه نسبت به میانگین) حدود ۵.۵٪ است؛ بدین معنا که همگی به‌طور معنی‌داری داخل معیار پذیرش $\pm 10\%$ قرار دارند. این مشاهده تأیید می‌کند که «اختلاط هسته‌ای مقطع» در بازه تغییر مقیاس نصف تا دو برابر، عملاً ناوابسته از مقیاس است و لذا تحلیل‌های تفصیلی بخش بعدی را می‌توان با اتکا به مقیاس مبنا پیش برد، بی‌آن‌که دقت استنتاج‌ها به شکل معناداری تحت تأثیر قرار گیرد.

جدول ۶- پارامترهای شاخص CMI در سه مقیاس

Table 6. CMI index for the three scales			
Scale	CMI60	CMI70	CMI80
Sc.1	0.935	0.937	0.939
Sc.2	0.897	0.893	0.899
Sc.3	0.885	0.883	0.889

عددی این شاخص‌ها لزوماً برابر نخواهند بود. از این‌رو، در جدول ۷ مقایسه به‌صورت «نیمه‌کمی» انجام شده است؛ بدین معنا که به‌جای مقایسه مستقیم مقدار شاخص‌ها، روندهای فیزیکی قابل مقایسه شامل ساختار جریان، ناهمگنی شعاعی و سطح اختلاط ناحیه مرکزی بررسی شده است. این رویکرد در مطالعات هیدرودینامیک بسترهای سیال رایج است، زیرا شاخص‌های مختلف اختلاط در اصل توصیف‌کننده یک پدیده فیزیکی مشترک هستند، هرچند مقادیر عددی آن‌ها متفاوت باشد.

Table 7. Comparison of the present results with previous studies

Reference	System	Comparable Quantity	Reported Result in the Literature	Result of the Present Study	Agreement Assessment
Babaei & Movahedirad (2023) [14]	Cold pseudo-2D bed	Solid volume fraction uniformity	High uniformity in the core region	CMI \approx 0.9 in the core	Experimental results from this study were used for validation. Flow structure agreement; indices differ but the physical phenomenon is consistent.
Zhao et al. (2013) [3]	Industrial MTO reactor	Radial solid distribution	Solid concentration in the core	Core concentration observed	Similar trend; the present study quantifies its scale dependence. Different index used, but comparable mixing intensity range.
Lu et al. (2016) [5]	MTO reactor	Near-wall heterogeneity	Strong gradient near the wall	Wall effects reduced with scale	The results of both studies indicate that the near-wall heterogeneity arises from geometric constraints, and its intensity decreases with increasing scale or with a reduction in the surface-to-volume ratio..
Julián et al. (2012) [19]	Pseudo-2D bed	Variance-based mixing index	High mixing in the core	High CMI in the core	
Rennebaum et al. (2025) [20]	Pseudo-2D and 3D systems	Wall effect	Stronger in pseudo-2D	Decreases with increasing scale	

۵-نتیجه گیری

در این پژوهش، رفتار هیدرودینامیکی یک بسترسیال چرخشی سرد شبه دوبعدی مرتبط با فرایند MTO در سه مقیاس هندسی مختلف، به صورت تجربی و عددی مورد بررسی قرار گرفت. مدل دوفازی اویلری-اویلری مبتنی بر نظریه جنبشی ذرات (KTGF) در محیط OpenFOAM توسعه داده شد و با داده‌های تجربی میدان سرعت و کسر حجمی ذرات حاصل از روش PIV-DIA اعتبارسنجی گردید. مقایسه نتایج نشان داد که مدل عددی قادر است الگوی جریان شامل هسته صعودی مرکزی و نواحی نزولی مجاور دیواره را با دقت مناسب بازتولید کند و بیشینه سرعت فاز جامد را با خطای کمتر از ۱۰ درصد ($RMSE=0.05$) پیش‌بینی نماید.

نتایج شبیه‌سازی در سه مقیاس نشان داد که افزایش ابعاد هندسی تا حدود دو برابر موجب تغییر ماهیت جریان نمی‌شود. الگوی اصلی شامل جریان صعودی مرکزی و گردش نزولی نزدیک دیواره‌ها در هر سه مقیاس ثابت باقی می‌ماند و هیچ جابه‌جایی معناداری در موقعیت این نواحی مشاهده نگردید. از نظر کمی، اختلاف کسر حجمی بین ناحیه رقیق مرکزی و نواحی چگال دیواره با افزایش مقیاس تا ۱۵ درصد کاهش یافت که بیانگر افزایش یکنواختی غلظت و کاهش اثرات دیواره در مقیاس‌های بزرگ‌تر است.

برای تحلیل اختلاط، شاخص CMI در سه مقیاس محاسبه شد. مقدار این شاخص در ناحیه مرکزی بین $0/88$ تا $0/94$ به دست آمد و تغییرات آن بین مقیاس‌ها کمتر از $5/5$ درصد بود. این یافته نشان می‌دهد که اختلاط فاز جامد در هندسه‌های مشابه‌شده شبه دوبعدی، عملاً وابستگی قابل توجهی به مقیاس ندارد و رفتار اختلاطی سامانه در هر سه اندازه پایدار باقی می‌ماند.

به‌طور کلی، این پژوهش با ارائه‌ی یک چارچوب اعتبارسنجی شده و تحلیل سه‌مقیاسی، خلأ مهمی در ادبیات هیدرودینامیک بسترهای سیال چرخشی مرتبط با فرایند MTO را پوشش می‌دهد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که مدل CFD ارائه شده می‌تواند با اطمینان برای تحلیل مقیاس‌گذاری، طراحی هندسی، و شبیه‌سازی‌های واکنشی آینده شامل بررسی گردش کاتالیست، الگوی تشکیل کک و عملکرد راکتورهای صنعتی مورد استفاده قرار گیرد.

لازم به ذکر است در این مطالعه دو سرعت گاز به‌عنوان نقاط نماینده در رژیم‌های انتخاب شدند تا اثر شدت سیال‌سازی بر الگوی جریان و اختلاط، بدون تغییر رژیم غالب، بررسی شود. تمرکز اصلی مقاله بر اثر مقیاس‌گذاری هندسی تحت شرایط برابر است؛ لذا توسعه دامنه سرعت‌ها و تغییر خواص ذرات که مستلزم مجموعه آزمایش‌ها، شبیه‌سازی‌های بیشتر و اعتبارسنجی مجدد در هر حالت است، به عنوان کارهای پیشنهادی آتی پیشنهاد می‌گردد.

- [1]. Tian, P., Wei, Y., Ye, M., & Liu, Z. (2015). Methanol to olefins (MTO): from fundamentals to commercialization. *Acs Catalysis*, 5(3), 1922–1938.
- [2]. Soundararajan, S., Dalai, A., & Berruti, F. (2001). Modeling of methanol to olefins (MTO) process in a circulating fluidized bed reactor. *Fuel*, 80(8), 1187–1197.
- [3]. Zhao, Y., Li, H., Ye, M., & Liu, Z. (2013). 3D numerical simulation of a large scale MTO fluidized bed reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(33), 11354–11364.
- [4]. Ghaemi, A., khani, M., Nasiri, M., & Ghasemi, M. (2016). The effect of using a secondary distributor on the hydrodynamics of fluidized bed reactors. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 14(82), 75–85, in Persian.
- [5]. Lu, B., Luo, H., Li, H., Wang, W., Ye, M., Liu, Z., & Li, J. (2016). Speeding up CFD simulation of fluidized bed reactor for MTO by coupling CRE model. *Chemical Engineering Science*, 143, 341–350.
- [6]. Lu, B., Zhang, J., Luo, H., Wang, W., Li, H., Ye, M., & Li, J. (2017). Numerical simulation of scale-up effects of methanol-to-olefins fluidized bed reactors. *Chemical Engineering Science*, 171, 244–255.
- [7]. Zhang, J., Lu, B., Chen, F., Li, H., Ye, M., & Wang, W. (2018). Simulation of a large methanol-to-olefins fluidized bed reactor with consideration of coke distribution. *Chemical Engineering Science*, 189, 212–220.
- [8]. Wan, Z., Yang, S., Hu, J., & Wang, H. (2022). Computational fluid dynamics (CFD) study of a commercial-scale methanol-to-olefins (MTO) fluidized bed reactor. *Fuel*, 327, 125208.
- [9]. Zhang, C., Lu, B., Yuan, X., Li, H., Ye, M., & Wang, W. (2021). Reactive simulation of industrial methanol-to-olefins fluidized bed reactors and parameter analysis. *Powder Technology*, 393, 681–691.
- [10]. Zhuang, Y.-Q., Chen, X.-M., Luo, Z.-H., & Xiao, J. (2014). CFD–DEM modeling of gas–solid flow and catalytic MTO reaction in a fluidized bed reactor. *Computers & chemical engineering*, 60, 1–16.
- [11]. Fattahi, M., Behbahani, R., & Nikou, M. R. K. (2023). Mathematical Modeling, Simulation of Reaction, and Regeneration Sections of MTO Process. *Authorea Preprints*.
- [12]. Sedighi, M., & Mohammadi, M. (2022). Simulation of fluidized bed reactor using computational fluid dynamics in the process of methanol conversion to light olefins; Kinetic modeling study. *Journal of Petroleum Research*, 31(1400-6), 103–115.
- [13]. Gholami, F., Movahedirad, S., Sobati, M. A., & Babaei, M. (2024). Numerical study of the gas–solid flow pattern in methanol to olefins fluidized bed reactor: Cold model. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 102(1), 177–195.
- [14]. Babaei, M., & Movahedirad, S. (2023). Hydrodynamics of a cold circulating fluidized bed for methanol-to-olefins (MTO) process: experimental and computational investigation. *Scientific Reports*, 13(1), 18349.
- [15]. Grasa, G., & Abanades, J. (2001). A calibration procedure to obtain solid concentrations from digital images of bulk powders. *Powder technology*, 114(1-3), 125–128.
- [16]. Danckwerts, P. (1952). The definition and measurement of some characteristics of mixtures. *Applied Scientific Research, Section A*, 3(4), 279–296.
- [17]. Ferrari, C., Beccati, N., & Magri, L. (2025). Numerical Mixing Index: Definition and Application on Concrete Mixer. *Fluids*, 10(3), 72.
- [18]. Lacey, P. M. C. (1954). Developments in the theory of particle mixing. *Journal of applied chemistry*, 4(5), 257–268.
- [19]. Julián, I., Gallucci, F., van Sint Annaland, M., Herguido, J., & Menéndez, M. (2012). Coupled PIV/DIA for fluid dynamics studies on a two-section two-zone fluidized bed reactor. *Chemical Engineering Journal*, 207, 122–132.
- [20]. Rennebaum, H. S., Brummerloh, D. L., Benders, S., & Penn, A. (2025). The hydrodynamics of pseudo-2D and 3D bubbling fluidized beds: a magnetic resonance imaging study. *Chemical Engineering Science*, 122977.

Hydrodynamic Scaling and Mixing Characteristics of a Circulating Pseudo-2D Fluidized Bed Relevant to MTO Reactors: Experimental Validation and CFD Study

Mojtaba Babaei¹, Salman Movahedirad²

1- PhD student Student of Chemical Engineering, School of Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology (IUST), Tehran, Iran

2- Associate Professor of Chemical Engineering, School of Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology (IUST), Tehran, Iran

movahedirad@iust.ac.ir

Abstract

In this study, the hydrodynamic behavior of a cold circulating pseudo-2D fluidized bed relevant to the methanol-to-olefins (MTO) process is investigated experimentally and numerically across three geometrically scaled configurations. Experimental measurements of the solid-phase velocity field and volume fraction were obtained using high-speed imaging combined with PIV–DIA techniques. A two-fluid Eulerian–Eulerian CFD model incorporating the Kinetic Theory of Granular Flow (KTGF) was developed in OpenFOAM and validated against the experimental data. The comparison showed that the model accurately captures the core upward flow, reproducing the peak solid velocity with less than 10% deviation, while preserving the near-wall velocity gradients observed experimentally. Following validation, the model was applied to three geometric scales (Sc1, Sc2, Sc3). Results indicate that scaling the geometry by up to a factor of two does not alter the qualitative structure of the hydrodynamics: in all scales, a stable upward core region and downward near-wall recirculation zones persist without meaningful spatial displacement. The solid volume-fraction distributions also retain their characteristic pattern, although the difference between the central dilute region and the denser wall regions decreases by up to 15% in larger scales, indicating enhanced natural mixing. To quantify mixing, the Cluster Mixing Index (CMI) was evaluated for all scales. The CMI in the central region ranged from 0.88 to 0.94, with a relative variation below 5.5%, demonstrating that the degree of solids mixing is effectively scale-independent within the investigated similarity-based geometries. These findings confirm that the validated CFD framework provides a reliable basis for hydrodynamic scale-up and can accurately predict mixing behavior in larger pseudo-2D circulating fluidized beds relevant to industrial MTO applications.

Keywords: Circulating fluidized bed (CFB), Pseudo-2D; MTO, Eulerian–Eulerian simulation, KTGF, Hydrodynamic scale-up, Solid-phase mixing, CMI index, Experimental validation.