

# مدل‌سازی جریان سه‌فازی گاز-مایع - جامد راکتور بالارونده FCC

پژوهش‌نفت

سال بیستم

شماره ۶۲

صفحه ۶۴-۵۲، ۱۳۸۹

یعقوب بهجت<sup>۱</sup>، شاهرخ شاه‌حسینی<sup>۱</sup> و مهدی احمدی‌مروست<sup>۲</sup>

۱- دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی

۲- پژوهشگاه صنعت نفت، پژوهشکده مهندسی توسعه فرایندهای شیمیایی

Shahrokh@iust.ac.ir

## چکیده

شکست کاتالیستی سیال (FCC)، فرایندی برای تبدیل برش‌های سنگین نفت به محصولات با ارزش می‌باشد. در تحقیق حاضر، شبیه‌سازی CFD هیدرودینامیک و انتقال حرارت راکتور استوانه‌ای بالارونده سه‌فازی (گاز-مایع-جامد) فرایند FCC با در نظر گرفتن تبخیر قطرات مایع انجام شده است. به دلیل عدم تقارن ورودی، بخار، ذرات کاتالیست و قطرات خوراک اتمایز شده به صورت سه‌بعدی مدل‌سازی شده است. برای مدل‌سازی فاز گاز و ذرات کاتالیست از دیدگاه اولری شامل معادلات پیوستگی، مومنتوم، بقای اجزاء شیمیایی و انتقال حرارت برای هر دو فاز گاز-جامد و معادله دمای دانه‌ای برای ذرات کاتالیست استفاده شده است. هیدرودینامیک، انتقال حرارت و انتقال جرم (تبخیر قطرات) خوراک تزریق شده به راکتور بالارونده نیز با استفاده از دیدگاه لاگرانژی مدل‌سازی شده و نتایج شبیه‌سازی هیدرودینامیکی راکتور بالارونده با استفاده از داده‌های تجربی موجود معتبرسازی شده است. مقایسه مقادیر سرعت دو فاز گاز-جامد حاصل از نتایج مدل با داده‌های تجربی تطابق خوبی را نشان می‌دهد. نتایج مدل‌سازی جریان سه‌فازی، شامل میدان جریان، کسر حجمی هر فاز، تغییرات دمایی برای هر دو فاز گاز و ذرات کاتالیست و همچنین تغییرات اندازه و دمای

قطرات خوراک اتمایز شده در راکتور بالارونده به دست آمده است. نتایج مدل‌سازی نشان می‌دهد زمان گرم شدن قطرات مایع، متناسب با قطر اولیه آنها می‌باشد و نیز عمل انتقال حرارت به قطرات مایع سریع بوده و این مرحله عامل محدود کننده در عملکرد راکتور بالارونده نمی‌باشد. در مرحله گرم شدن و تبخیر قطرات، مقدار بسیار کمی از جرم قطره تبخیر می‌شود و پس از رسیدن قطره به دمای نقطه جوش، قطر قطرات با شدت کاهش پیدا می‌کنند و کل قطره مایع در کسری از طول راکتور بالارونده تبخیر می‌شود. همچنین در این تحقیق رابطه‌ای برای زمان تبخیر کامل قطرات مایع توسعه داده شده است.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی CFD، راکتور بالارونده FCC،

جریان گاز-مایع-جامد، تبخیر قطره، بسترسیال

## مقدمه

فرایند شکست کاتالیستی سیال<sup>۱</sup> (FCC)، از فرایندهای مهم صنعت پالایش به منظور تبدیل اجزای سنگین نفت به محصولات با ارزش همانند بنزین، فرآورده‌های میان تقطیر و الفین‌های سبک می‌باشد. در داخل راکتور بالارونده<sup>۲</sup>

1. Fluid Catalytic Cracking  
2. Riser Reactor

سیال، انتقال حرارت و پدیده‌های مربوطه نظیر واکنش‌های شیمیایی در سیستم‌های با معادلات پیچیده درآمده است و موضوع تحقیقات بسیاری از محققین دنیا می‌باشد. مزایای منحصر به فرد CFD در طراحی سیستم‌های چندفازی نسبت به روش‌های تجربی شامل کاهش اساسی در زمان و هزینه طراحی‌های جدید، توانایی مطالعه سیستم‌هایی که انجام آزمایش‌های کنترل شده روی آنها مشکل و یا غیر ممکن است، دسترسی به اطلاعات کامل با جزئیات زیاد برای پیش‌بینی پارامتری موضوعی، بهینه‌سازی و همچنین توانایی شبیه‌سازی شرایط واقعی فرایند می‌باشد [۷-۴].

بیش از ۹۰ درصد مقالات منتشر شده در رابطه با مدل‌سازی CFD راکتور بالارونده فرایند FCC به مدل هیدرودینامیک و تنها با در نظر گرفتن دو فاز گاز-جامد محدود شده است و کارهای انجام شده با در نظر گرفتن تبخیر و انتقال جرم از قطرات مایع، بسیار کم می‌باشد. در این پژوهش‌ها نوآوری‌ها و بحث‌ها بر روی ضرایب درگ و تعیین دقیق مدل برهمکنش بین‌فازی متمرکز است. تمام این مدل‌ها از مدل‌های توربولنس دو معادله‌ای برای بررسی جریان آشفتگی استفاده کرده‌اند [۱۶-۴]. در ادامه چند مورد از کارهای انجام شده در رابطه با مدل‌سازی CFD راکتور بالارونده مورد بررسی قرار گرفته است.

Gao و همکارانش [۱۷] مدل جریان توربولنس دو فازی بدون در نظر گرفتن اثر قطرات مایع با سینتیک واکنش شیمیایی چند لامپی را با استفاده از CFD مدل کردند. Benyahia و همکارانش از مدل دو بعدی و همچنین Novia و همکارانش از مدل سه بعدی جریان دو فازی گاز-جامد برای بررسی هیدرودینامیک و واکنش‌های شکست استفاده کردند. مدل آنها شامل فرضیات زیادی است ولی هر دو از مدل‌سازی قطرات مایع صرف نظر کرده‌اند [۱۸، ۱۹].

آزمایشگاه بین‌المللی Argonne (ANL) در حال توسعه کد ICRKFL برای مدل‌سازی راکتور بالارونده فرایند FCC است. این کد، روش‌های ارتباط سینتیک شیمیایی و هیدرودینامیک برای بررسی تأثیر شرایط عملیاتی و طراحی در راکتور بالارونده FCC را به کار می‌گیرد.

کاتالیست‌های داغ به منظور انجام واکنش‌های گرماگیر شکست کاتالیستی با خوراک برخورد می‌کنند. گرمای لازم برای واکنش‌های کراکینگ کاتالیستی توسط ذرات کاتالیست با دمای بالا تامین می‌شود.

گرمای لازم برای واکنش‌های کراکینگ کاتالیستی توسط ذرات کاتالیست با دمای بالا تامین می‌شود. خوراک پیش‌گرم از طریق چندین اتمایزر به صورت قطرات ریز وارد راکتور می‌شود و با کاتالیست فعال در تماس قرار گرفته و واکنش‌ها انجام می‌شود. فرایند FCC علاوه بر اهمیت اقتصادی، از لحاظ کاهش آلاینده‌گی و رفع مشکلات زیست محیطی نیز حائز اهمیت است. بدین ترتیب که در صورت جایگزینی فرایند FCC با روش‌های قبلی برای تولید بنزین در پالایشگاه‌ها، می‌توان بر محدودیت‌های زیست محیطی نظیر تولید آروماتیک، بنزن و سرب غلبه کرد. علی‌رغم همه فواید موجود در این فرایند، به علت پیچیدگی زیاد و ناشناخته بودن هیدرودینامیک سیستم، تجزیه و تحلیل و کنترل فرایند FCC، از مشکلات جدی‌ترش این واحد به‌شمار می‌رود که می‌توان دلایل آن را به صورت زیر برشمرد [۳-۱]:

(۱) پیچیدگی زیاد و ناشناخته بودن هیدرودینامیک سیستم  
(۲) سینتیک پیچیده واکنش‌های شکست کاتالیستی  
(۳) ارتباط تنگاتنگ بین عملکرد راکتور بالارونده و احیاکننده توزیع اندازه قطرات تزریق شده به بستر سیال گاز O جامد و مشخصه‌های ذرات جامد، کیفیت کلی هیدرودینامیک فرایند را در راکتور بالارونده معین می‌کند. خوراک مایع پیش‌گرم شده از طریق چندین نازل به راکتور بالارونده تزریق می‌شود. کاتالیست داغ با قطرات خوراک تزریق شده برخورد می‌کند و گرمای تبخیر قطرات خوراک را فراهم می‌آورد. تبخیر جزئی خوراک موجب تشکیل سه فاز کاتالیست جامد، هیدروکربن مایع و گاز شامل بخار هیدروکربن‌ها و بخار سیال ساز می‌شود. بعد از تبخیر کامل خوراک هیدروکربنی، تنها دو فاز کاتالیست جامد و گاز وجود دارد و ذرات کاتالیست در راکتور بالارونده به صورت پنوماتیک<sup>۱</sup> به راکتور احیا کننده انتقال می‌یابند [۱، ۲].

امروزه علم دینامیک سیالات محاسباتی<sup>۲</sup> (CFD) به صورت یک ابزار قدرتمند و توانا برای تحلیل رفتار جریان

1. Pneumatic

2. Computational Fluid Dynamic

### معادلات حاکم بر راکتور بالارونده فرایند FCC

در این تحقیق از مدل سیال دو گانه با دیدگاه اولری-اولری برای مدل سازی جریان آشفته بستر سیال گاز-مایع-جامد راکتور بالارونده استفاده شده است. هر سه فاز بر حسب مجموعه معادلات بقا با عوامل برهم کنش مناسب که بیانگر ارتباط معادلات فازها با هم است، بیان می شوند. معادلات هیدرودینامیکی، انتقال حرارت و انتقال جرم حاکم بر فازهای گاز و جامد بر اساس دیدگاه اولری-اولری شامل معادله موازنه جرم، مومنتوم، بقای اجزای شیمیایی و انتقال حرارت برای فازهای گاز و جامد و همچنین معادله انتقال انرژی دانه ای برای ذرات کاتالیست (بیانگر سرعت نوسانی ذرات) می باشد. در این مقاله از ذکر جزئیات این معادلات صرف نظر می شود. جزئیات دقیق معادلات هیدرودینامیکی و انتقال حرارت برای جریان گاز-جامد به طور مفصل در منابع آمده است [۱۷-۵].

همچنین تبخیر قطرات تزریق شده در قالب دیدگاه لاگرانژی در نظر گرفته شده است. در دیدگاه لاگرانژی، حرکت هر ذره از طریق حل معادله لاگرانژی برای تمام ذرات صورت می پذیرد. این روش مدل سازی، راه منطقی برای شبیه سازی ذرات پیچیده در سطح فرایندهایی همچون تبخیر می باشد. انتقال حرارت و جرم و واکنش های شیمیایی که در مقیاس ذره منفرد اتفاق می افتد می تواند با استفاده از این دیدگاه به طور مناسب بیان شود. اما این دیدگاه به منابع عظیم محاسباتی نیاز دارد و با توجه به اینکه انتقال مومنتوم، انتقال حرارت و تبخیر قطرات مایع با هم مرتبط می باشند و به طور همزمان در راکتور بالارونده FCC اتفاق می افتد، نکته ای است که از اهمیت بالایی برخوردار است. بر همکنش میان فازهای پیوسته و پراکنده با فرمولاسیون مناسبی از عوامل ارتباط بین فازی در نظر گرفته شده است. نیروی برهمکنش میان فاز گاز و جامد شامل نیروی درگ و نیروی شناوری در نظر گرفته شده و از مدل درگ Syamlal-O'Brien برای محاسبه ضریب درگ استفاده شده است. با توجه به اینکه در این مطالعه، میدان جریان آشفته می باشد، انتقال مومنتوم بین فاز گاز-جامد فرایند غالب می باشد. برای محاسبه انتقال مومنتوم بین ذرات کاتالیست به منابع عظیم محاسباتی نیاز است، لذا انتقال

Chang و همکارانش [۲۰] از این برنامه برای مطالعه اثر پارامترهای تزریق خوراک بر روی اختلاط، انتقال حرارت، تبخیر و بازده محصولات استفاده کردند. Nayak و همکارانش تبخیر و شکست نفت مایع تزریق شده به راکتور بالارونده گاز O جامد را مورد مطالعه قرار دادند. در این تحقیق از دیدگاه اولری-لاگرانژی برای شبیه سازی تبخیر و واکنش های شکست در راکتور بالارونده FCC استفاده شده است. نتایج پیش بینی شده از مدل با داده های صنعتی منتشر شده ارزیابی شده است [۲۱].

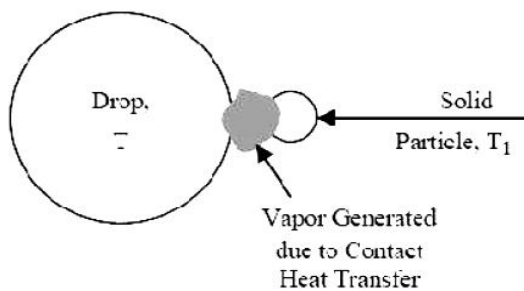
بازبینی گسترده ای از مدل های CFD دو سیالی و معادلات حاکم و روابط تشکیل دهنده برای بسترهای سیال، نشان داده است که ریز کردن گره ها، انتخاب مدل های مکمل شبیه سازی هیدرودینامیک و انتقال حرارت جریان گاز-جامد با در نظر گرفتن حضور فاز مایع بسیار مشکل است. در این مطالعه از تکنیک CFD برای فهم پدیده های پیچیده هیدرودینامیک، انتقال حرارت و تبخیر قطرات مایع در راکتور بالارونده FCC شامل جریان پیچیده گاز-مایع-جامد استفاده شده است.

مرور گذرای تحقیقات انجام شده بر روی مشخصه های مختلف راکتور بالارونده FCC، نیاز به مطالعات و تحقیقات بیشتر را آشکار می سازد. در بسیاری از مدل های CFD انجام گرفته فرض بر این است که ذرات جامد با جریان گاز به طور خیلی سریع مخلوط شده و قطرات خوراک بلافاصله تبخیر می شوند، با در نظر گرفتن این فرض بیشتر کارهای انجام شده منحصر به مدل سازی دو فازی هیدرودینامیک راکتور می باشد [۱۹-۱۷].

در این مطالعه توجه ویژه ای به ناحیه مخلوط شدن (جریان سه فازی) که تأثیر قابل ملاحظه ای روی عملکرد فرایند FCC دارد، معطوف می شود. به طوری که در این مطالعه، مدل سازی CFD جریان چند فازی با در نظر گرفتن قطرات مایع با مدل فاز پراکنده برای شبیه سازی هیدرودینامیک و تبخیر خوراک انجام شده است و در نهایت رابطه دقیقی برای زمان عمر قطره پیشنهاد شده است. جزئیات مدل محاسباتی قطرات خوراک در جریان گاز O جامد با استفاده از دیدگاه اولری O لاگرانژی در بخش های بعدی آورده شده است.

### انتقال حرارت از فاز گاز به قطرات مایع خوراک

در مورد انتقال حرارت به قطرات هیدروکربن مایع در حال تبخیر در متون احتراق بحث شده است به طوری که انتقال حرارت به قطرات مایع سردی که به محیط داغ وارد می شود مورد توجه و بحث قرار گرفته است. در منابع علمی زمان عمر قطره مایع به دو فاز که همدیگر را همپوشانی می کنند تقسیم شده است. در فاز اول دمای قطره مایع به سرعت افزایش می یابد و مقدار تبخیر از قطره مایع، کم است. در فاز دوم، دمای قطره به طور خیلی آهسته افزایش می یابد و نرخ تبخیر و انتقال جرم زیاد می باشد. زمانی که ذره جامد با قطره مایع بر خورد می کند، ذره جامد انرژی را به قطره مایع انتقال می دهد. اگر انتقال حرارت خیلی سریع باشد، دمای ذره جامد به دمای مایع می رسد. با توجه به عملکرد راکتور بالارونده FCC و موقعیت تزریق خوراک و ذرات کاتالیست، بخارهای تولید شده به دلیل تبخیر قسمتی از قطره، ذره کاتالیست را دور از قطره نگه خواهد داشت به طوری که انتقال حرارت از ذرات جامد به قطره مایع به تعویق می افتد. مطابق با سه رژیم مختلف انتقال حرارت و انتقال جرم میان فاز پیوسته و پراکنده، سه مدل حرارت دادن خنثی، تبخیر از قطره و جوشش قطره مورد نظر می باشد [۲۰-۱۷]. شماتیک این فرایند در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱- شماتیکی از مکانیسم انتقال حرارت از ذرات کاتالیست به قطرات مایع [۲۰]

### حرارت دادن خنثی

اگر دمای قطره مایع کمتر از دمای تبخیر قطره باشد، حرارت دادن خنثی مورد توجه قرار می گیرد. در چنین حالتی از معادله زیر برای مرتبط کردن دمای قطره به انتقال حرارت استفاده می شود:

$$m_D C_{PD} \frac{dT_D}{dt} = h A_D (T_\infty - T_D) \quad (3)$$

مومنتوم بین ذرات کاتالیست فرض می شود. انتقال حرارت میان سیال و جامد تابعی از اختلاف دما بین دو فاز می باشد و در کار حاضر از رابطه ارائه شده توسط Gunn (۱۹۷۸) برای محاسبه انتقال حرارت بین دو فاز گاز و جامد استفاده شده است [۴, ۱۶, ۲۰].

تعداد عواملی که در معادلات مومنتوم در جریان های چند فازی مدل می شوند، بیشتر است، این امر مدلسازی جریان توربولانس جریان های چند فازی را فوق العاده سخت می کند و لذا مدل توربولانسی پراکنده برای حالتی که غلظت فاز دوم رقیق باشد، مدل مناسبی است. در این حالت از برخوردهای بین ذرات صرف نظر می شود و فرایند غالب، فرایند توربولانسی فاز اول می باشد. مقادیر نوسانات فاز دوم در بخش هایی از مشخصه های فاز اصلی و زمان برهمکنش ذره- گردابه داده می شود. بدین ترتیب معادلات آشفتگی برای مدل توربولانس پراکنده به صورت زیر نوشته می شوند [۱۶-۲۰].

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g k_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g v_g k_g) = \nabla \cdot \left( \alpha_g \frac{\mu_{t,g}}{\sigma_k} \nabla k_g \right) + \alpha_g G_{kg} - \alpha_g \rho_g \epsilon_g + \alpha_g \rho_g \Pi_{kg} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \epsilon_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g v_g \epsilon_g) = \nabla \cdot \left( \alpha_g \frac{\mu_{t,g}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_g \right) + \alpha_g \frac{\epsilon_g}{k_g} (C_{1\epsilon} G_{kg} - C_{2\epsilon} \rho_g \epsilon_g) + \alpha_g \rho_g \Pi_{\epsilon g} \quad (2)$$

جریان های آشفته به شدت تحت تأثیر حضور دیواره قرار می گیرند. برای اعمال این تأثیرات بر روی معادلات حاکم، توابع خاصی به نام توابع دیواره تعریف می شوند. به طور عمده دو روش برای مدلسازی جریان آشفته در نزدیکی دیواره وجود دارد، در روش اول معادلات حاکم در لایه تحت تأثیر ویسکوزیته (زیر لایه های ویسکوز و بافر) حل نمی شوند و به جای آنها از فرمول های نیمه تجربی به نام توابع دیواره برای شبیه سازی ناحیه نزدیک دیواره استفاده می شود. در روش دوم مدل آشفتگی برای در نظر گرفتن ناحیه ویسکوز با مش بهینه اصلاح می شود. در این تحقیق از توابع دیواره با شبکه محاسباتی بهینه برای در نظر گرفتن اثرات دیواره بر روی جریان توربولانس استفاده شده است.

استفاده می‌شود (انرژی مورد نیاز برای تبخیر به‌عنوان عامل چشمه در معادله انرژی برای فاز گاز ظاهر می‌شود):

$$\frac{dD_D}{dt} = \frac{4K_\infty}{\rho_D C_{p\infty} D_D} \left( 1 + \frac{Nu_{eff}}{2} + Re_D^{1/2} \right) \times \quad (9)$$

$$\ln \left[ 1 + \frac{C_{p\infty} (T_\infty - T_D)}{\lambda} \right]$$

$$Nu_{eff} = \left( \frac{\phi \varepsilon_s \lambda \text{Pr}}{4C_{p\infty} (T_\infty - T_D)} \left[ Re_D - Re_s \frac{D_D}{D_s} \right] \times \left[ 1 + \frac{D_D}{D_s} \right]^2 \right) \quad (10)$$

### شبیه‌سازی CFD جریان سه‌فازی در راکتور بالارونده FCC

معادلات حاکم بر سیستم با استفاده از روش عددی حجم محدود با به‌کارگیری الگوریتم SIMPLE حل شده‌اند. طرح انفصال بالادست درجه اول و درجه دوم برای گسسته‌سازی معادلات حاکم به‌کارگرفته شد و دامنه حل به سلول‌های محاسباتی کافی تقسیم‌بندی شد. با توجه به اینکه جریان راکتور بالارونده چند فازی می‌باشد و همچنین راکتور بالارونده به‌صورت سه‌بعدی مدل‌سازی شده است و با توجه به اهمیت مدل‌سازی توربولنس در راکتور، شبکه محاسباتی بهینه برای همگرایی جریان چند فاز ایجاد شد. در شبیه‌سازی جریان درهم با استفاده از توابع دیوار تعادلی باید شرط  $300 < y^+ < 30$  برقرار باشد. با استفاده از فیزیک مسئله و انتخاب صحیح اولین حجم کنترل نزدیک دیواره به‌طوری‌که در ناحیه ویسکوز قرار گیرد، این شرط برقرار شد. شبکه محاسباتی بهینه طوری انتخاب شد که وابستگی نتایج حاصل از حل عددی، مستقل از تعداد سلول‌های محاسباتی باشد. معادلات انفصال جبری به‌دست آمده از روش صریح با استفاده از روش تکرار و اعمال شرایط مرزی و اولیه مناسب حل و سپس کسر حجمی ذرات کاتالیست، دانسیته و انرژی سینتیک توربولنس در نقاط اصلی (مرکز شبکه یا سلول محاسباتی) جای‌گذاری شد با استفاده از شبکه جابجا شده و مولفه‌های بردار سرعت در سطح، حجم کنترل حل می‌شود [۲۳، ۲۲، ۴]. به‌دلیل عدم تقارن ورودی بخار سیال‌ساز، ذرات کاتالیست و قطرات خوراک متمایز شده، راکتور بالارونده به‌صورت سه‌بعدی مدل شده است (شکل ۲). در جدول ۱ پارامترهای شبیه‌سازی جریان سه‌فازی در راکتور بالارونده را نشان می‌دهد.

با توجه به کسر حجمی بسیار پایین ذرات کاتالیست از تاثیر آنها بر روی ضریب انتقال حرارت قطرات مایع صرف‌نظر می‌شود و ضریب انتقال حرارت به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$Nu = \frac{hD_D}{K_\infty} = 2 + 0.6 Re_D^{1/2} Pr^{1/3} \quad (4)$$

در مورد ذرات جامد، تنها مدل حرارت دادن خنثی مورد توجه قرار می‌گیرد و ضریب انتقال حرارت جابجایی از رابطه معروف Ranz-Marshall محاسبه می‌شود.

### تبخیر از قطره

زمانی که تبخیر مایع شروع می‌شود، ضروری است که انتقال جرم از قطره همانند انتقال حرارت از سطح قطره مورد توجه قرار گیرد. این حالت زمانی آغاز می‌شود که دمای قطره به دمای تبخیر رسیده و تا زمانی که به دمای نقطه جوش برسد و یا تا زمانی که کسر جزء فرار کاملاً تبخیر شده باشد، ادامه پیدا می‌کند. نرخ تبخیر با مربوط کردن دبی تبخیر به گرادیان غلظت بخار میان سطح قطره و توده فاز گاز مدل می‌شود:

$$N_i = k_c (C_{i,s} - C_{i,\infty}) \quad (5)$$

ضریب انتقال جرم  $K_c$  از رابطه ارائه شده توسط Ranz-Marshall محاسبه می‌شود:

$$Sh = \frac{k_c D_D}{D_{i,m}} = 2.0 + 0.6 Re_D^{1/2} Sc^{1/3} \quad (6)$$

جرم قطره مایع در اثر انتقال جرم به فاز گاز به‌صورت زیر کاهش پیدا می‌کند:

$$m_D(t + \Delta t) = m_D(t) - N_i A_D M_i \Delta t \quad (7)$$

بر طبق موازنه انرژی که تغییرات گرمای محسوس در قطره را به انتقال حرارت جابجایی و نهان مربوط می‌کند، دمای قطره به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$m_D C_{pD} \frac{dT_D}{dt} = h A_D (T_\infty - T_D) + \frac{dm_D}{dt} \lambda \quad (8)$$

### جوشش قطره

این حالت زمانی آغاز می‌شود که دمای قطره به دمای جوش رسیده باشد و تا زمانی که جرم قطره از کسر غیر فرار بیشتر باشد  $(1 - f_v)$ ، ادامه می‌یابد. زمانی که قطره به نقطه جوش رسید، برای تغییر قطر آن از معادلات زیر

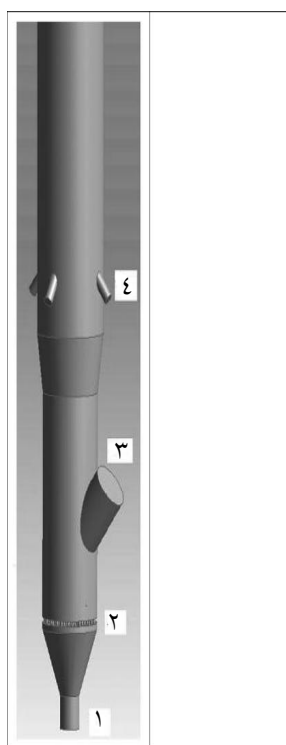
جدول ۱- پارامترهای شبیه‌سازی جریان سه فازی در راکتور بالارونده

۶۱۰ kg/m <sup>3</sup>	دانسیته قطرات مایع	۱۴۰۰ kg/m <sup>3</sup>	دانسیته ذرات کاتالیست
۳۵۲ K	دمای نقطه تبخیر قطره	۳/۶ kg/m <sup>3</sup>	دانسیته بخار سیال‌ساز اولیه
۵۴۵ K	دمای نقطه جوش قطره	۷۰ μm	قطر متوسط ذرات
۲۷۶۰ J/kgK	ظرفیت گرمایی قطرات مایع	۰/۹	ضریب ارتجاعی ذرات
۱۱۳۰ J/kgK	ظرفیت گرمایی ذرات کاتالیست	۸۷۳ K	دمای کاتالیست ورودی
۲۰۱۴ J/kgK	ظرفیت گرمایی بخار	۷۷۳ K	دمای بخار سیال‌ساز اولیه
۳۰۰ K	دمای قطرات ورودی	۲۲۲۰۰۰ J/kg	گرمای نهان تبخیر قطرات مایع

پروفایل سهموی دارد. این شکل مشخص می‌کند که نتایج قابل قبولی از مقایسه داده‌های پیش‌بینی شده توسط مدل و داده‌های تجربی به دست آمده است.

شکل ۴، مقایسه بین توزیع شعاعی سرعت گاز پیش‌بینی شده توسط مدل و داده‌های تجربی است. در این شکل توزیع شعاعی سرعت محوری بخار در دو ارتفاع ۱/۶ m و ۶/۶ m راکتور بالارونده را نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که نتایج شبیه‌سازی CFD در تطابق خوبی با سرعت‌های اندازه‌گیری شده می‌باشند. نتایج به دست آمده از شکل ۳ و ۴ نشان می‌دهد که مدل توربولنس به کار رفته و پارامترهای مربوطه قادر به شبیه‌سازی موفق جریان گاز- جامد در راکتور بالارونده FCC می‌باشد.

شکل ۵، توزیع کسر حجمی ذرات کاتالیست در محل ورود ذرات کاتالیست به راکتور بالارونده نشان می‌دهد. توزیع کسر حجمی ذرات کاتالیست در ابتدای شبیه‌سازی و راه‌اندازی یکنواخت نیست. با این وجود بعد از گذشت حدوداً ۵ ثانیه از عملکرد راکتور بالارونده و شبیه‌سازی آن، توزیع کسر حجمی ذرات کاتالیست یکنواخت می‌شود. البته ذکر این نکته ضروری است که چون رژیم جریانی در راکتور بالارونده توربولنس می‌باشد، زمان اقامت ذرات کاتالیست در راکتور بالارونده حدود ۲ الی ۳ ثانیه می‌باشد. با توجه به شکل ۵ ملاحظه می‌شود که ذرات کاتالیست در قسمت ورودی به راکتور بالارونده با توجه به شکل ۶، پروفایل دمایی سطح مقطع راکتور بالارونده در ارتفاع‌های مختلف بعد از اتمایز شدن قطرات خوراک را نشان می‌دهد. قطرات مایع تزریق شده، گرمای لازم برای

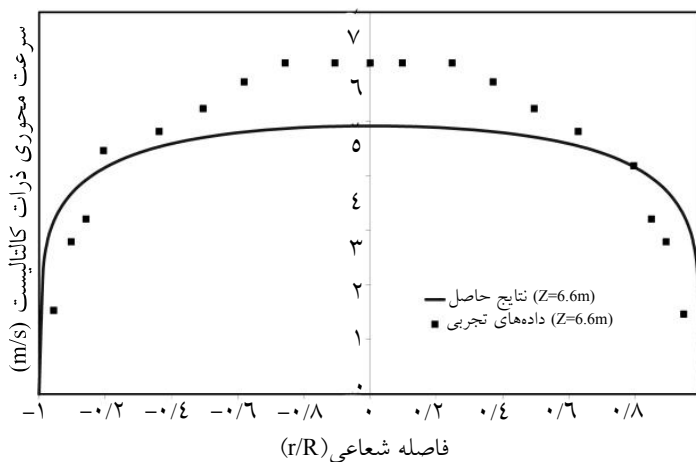
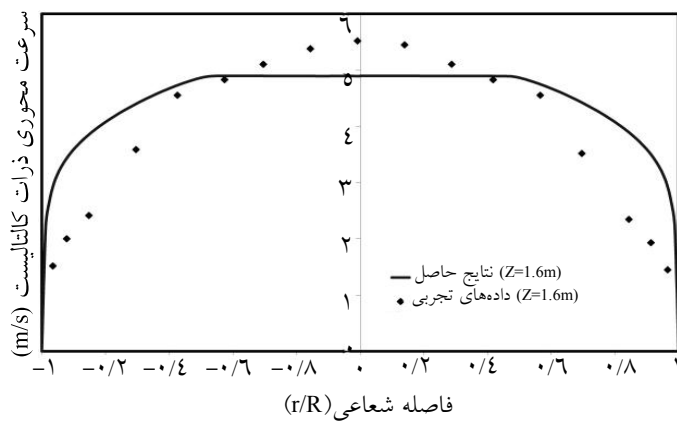


- ۱- محل ورود بخار سیال‌ساز
- ۲- صفحه توزیع کننده هوا
- ۳- محل ورود کاتالیست
- ۴- محل تزریق قطرات خوراک (اتمایزر)

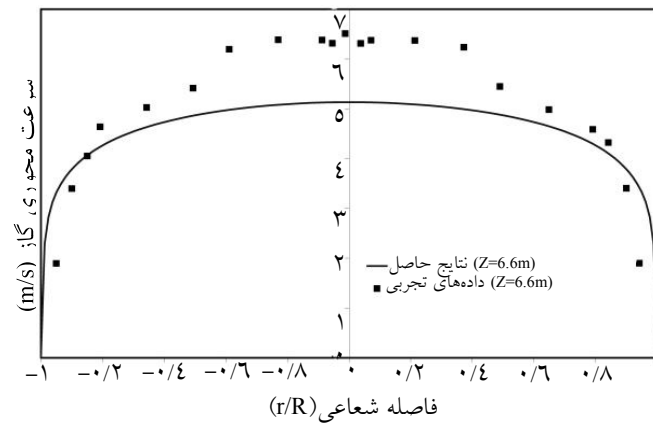
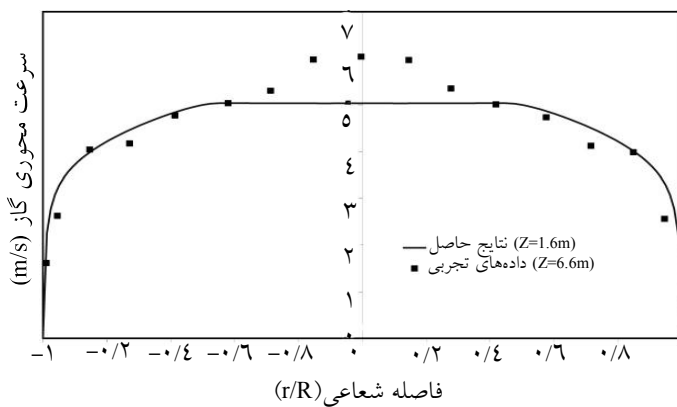
شکل ۲- شماتیکی از راکتور بالارونده بستر سیال فرایند FCC و اجزای آن

### نتایج و بحث

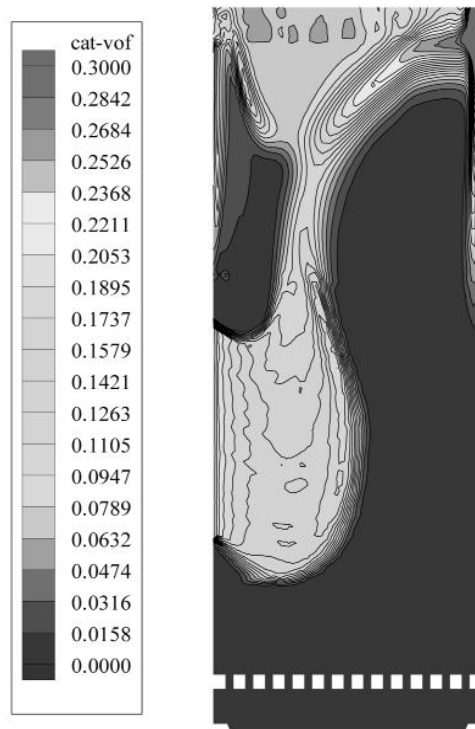
مدل توربولنس گاز- جامد با استفاده از داده‌های تجربی گزارش شده توسط Yang [۲۴] معتبرسازی و از تکنیک اندازه‌گیری لیزری سرعت<sup>۱</sup> برای اندازه‌گیری سرعت بخار و ذرات کاتالیست در راکتور بالارونده استفاده شد. شکل ۳ توزیع شعاعی سرعت ذرات کاتالیست در دو ارتفاع ۱/۶ m و ۶/۶ m از راکتور بالارونده را نشان می‌دهد. در این شکل داده‌های به دست آمده از مدل‌سازی CFD با داده‌های تجربی متناظر مقایسه شده است. در این حالت، الگوی جریان ذرات کاتالیست به دلیل کسر حجمی پائین،



شکل ۳- توزیع شعاعی سرعت ذرات کاتالیست در راکتور بالارونده



شکل ۴- مقایسه بین توزیع شعاعی سرعت محوری فاز گاز در راکتور بالارونده



شکل ۵- مقدار کسر حجمی کاتالیست در قسمت ورودی ذرات کاتالیست به راکتور بالارونده

دمای تبخیر شروع به تبخیر و انتقال جرم می‌کند. قبل از آنکه قطره به دمای تبخیر برسد، قطر قطره ثابت می‌ماند و انتقال حرارت از فاز گاز و ذرات کاتالیست تنها صرف افزایش دمای قطره تا نقطه جوش می‌شود. در مرحله تبخیر مقدار کمی از قطره تبخیر می‌شود و دمای آن افزایش پیدا می‌کند تا به نقطه جوش خوراک برسد. پس از رسیدن به نقطه جوش، قطره مایع شروع به تغییر فاز می‌کند و مقدار انتقال جرم در این مرحله زیاد می‌باشد به طوری که قطر قطره با شدت بیشتری کاهش پیدا می‌کند و در نهایت کل قطره مایع تبخیر می‌شود. ملاحظه می‌شود که هر اندازه قطر اولیه قطرات خوراک زیاد باشد انرژی بیشتری برای تبخیر کامل مورد نیاز است و قطرات خوراک، مسافت بیشتری را در طول راکتور بالارونده طی می‌کنند.

برای قطره مایع در حال تبخیر در محیط داغ با نفوذ در فاز گاز به‌عنوان مرحله محدود، Law (۱۹۸۲) نشان داد که قطر قطره با جذر زمان به‌صورت زیر کاهش می‌یابد [۲۴]:

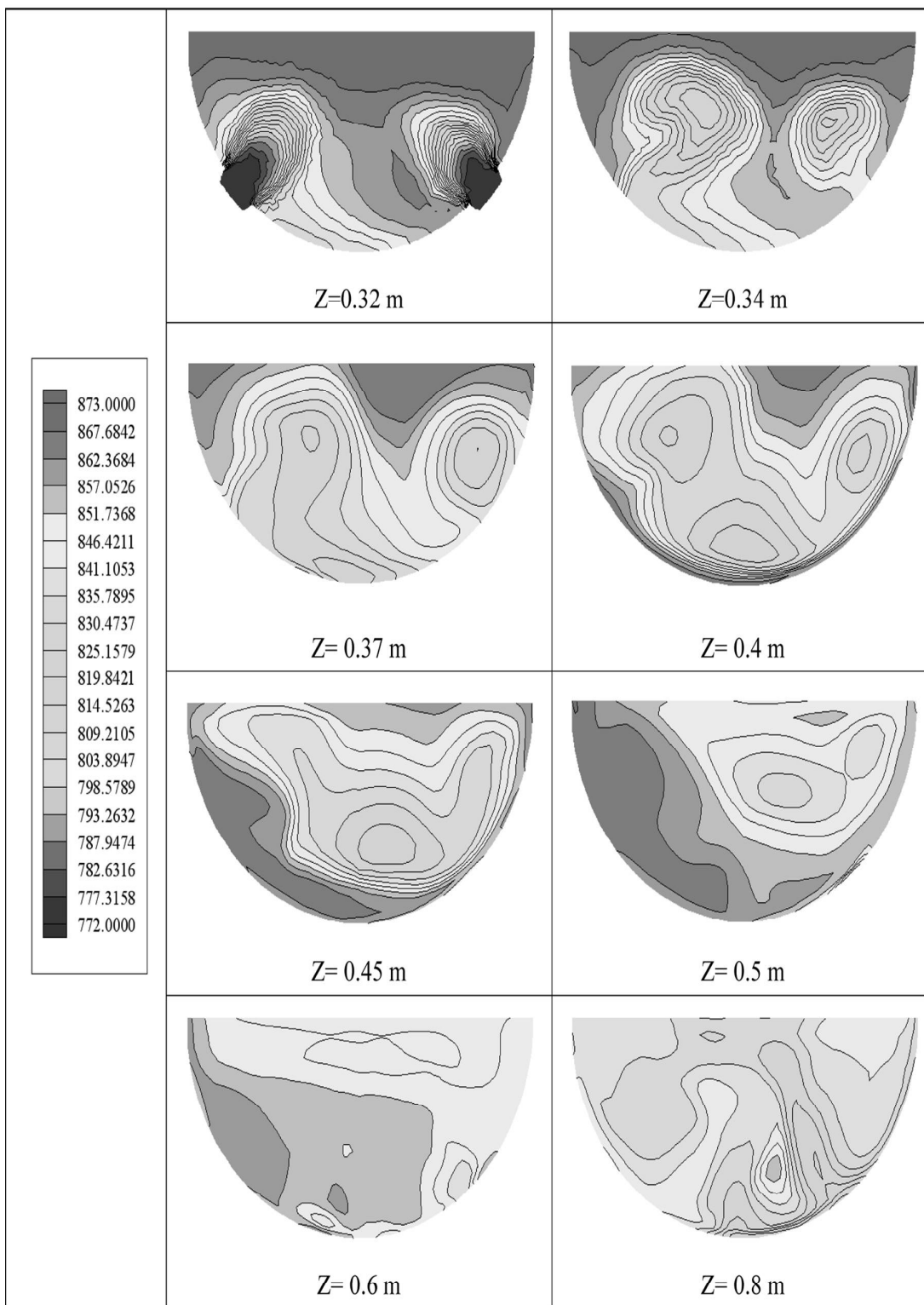
$$\left(\frac{d}{d_0}\right)^2 = kt \quad (11)$$

در رابطه بالا  $d_0$  قطر اولیه قطره،  $t$  زمان عمر قطره مایع و

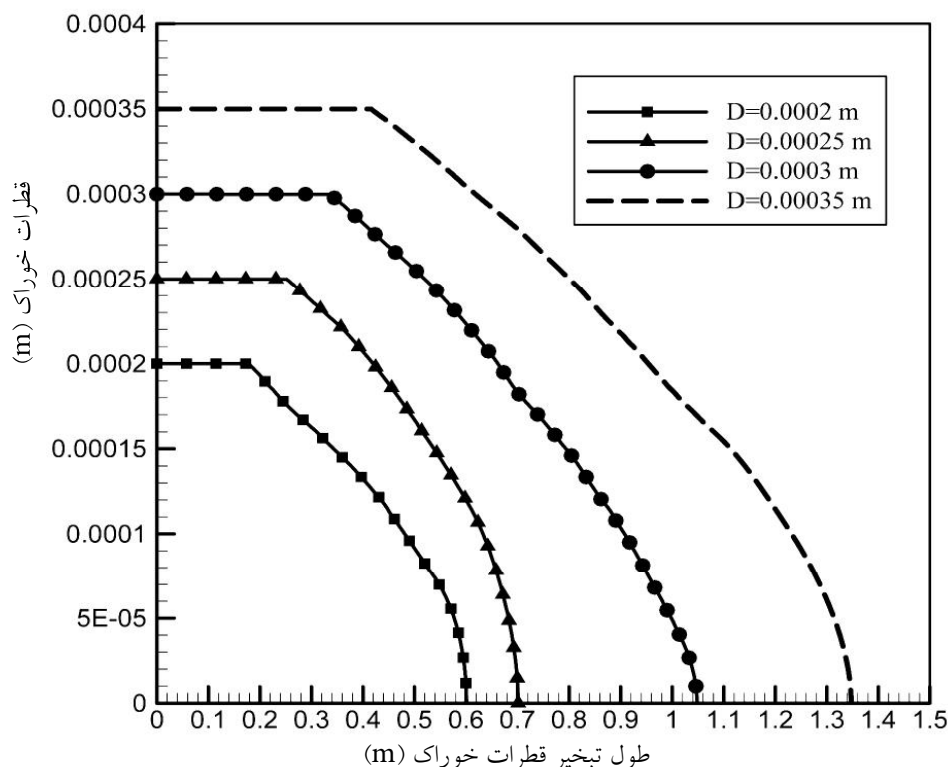
مرحله گرم شدن و تبخیر را از فاز گاز و ذرات کاتالیست دریافت می‌کنند. ملاحظه می‌شود که به دلیل اختلاف دما میان فازهای پیوسته (ذرات کاتالیست و بخار سیال‌ساز) و قطرات مایع خوراک تزریق شده به راکتور بالارونده، پروفایل دما در سطح مقطع راکتور بالارونده یکنواخت نیست و گرادیان دما در بین قطرات مایع و فاز پیوسته وجود دارد. در این مرحله ذرات کاتالیست و فاز گاز با قطرات خوراک آتمایز شده برخورد می‌کنند و گرمای محسوس و گرمای تبخیر قطرات مایع را فراهم می‌آورند. با افزایش ارتفاع و انتقال حرارت از فاز گاز به قطرات مایع و در نتیجه تبادل حرارت بین فازها، توزیع دمایی در سطح مقطع راکتور بالارونده یکنواخت‌تر می‌شود. بنابراین کاملاً مشخص است که توزیع دمایی در راکتور بالارونده به شدت به محل ورود و سرعت بخار سیال‌ساز ثانویه و قطرات مایع تزریق شده وابسته است.

نمودار تغییرات قطر قطرات خوراک تزریق شده در طول راکتور بالارونده در شکل ۷ آمده است. با توجه به شکل ملاحظه می‌شود که قطرات مایع پس از طی مسافتی در طول راکتور بالارونده گرم شده و پس از رسیدن به





شکل ۶- پروفایل دمایی فاز گاز در سطح مقطع راکتور بالارونده در ارتفاعهای مختلف بعد از تزریق قطرات مایع



شکل ۷- تغییر قطر قطرات خوراک مایع در طول راکتور بالارونده

رسیدن قطره مایع به دمای نقطه جوش، تغییرات دمایی در قطره وجود ندارد تا اینکه کل قطره تبخیر شود. کسر جرمی نفت‌گاز در فاز گاز که از تبخیر قطرات مایع حاصل می‌شود در شکل ۹ آمده است. با توجه به شکل، مشخص است که قطرات مایع اتمایز شده در طول راکتور بالارونده حرکت کرده و به تدریج تبخیر می‌شوند. مسیر حرکت و تبخیر قطرات مایع در راکتور بالارونده کاملاً مشخص است. بعد از رسیدن قطرات خوراک به دمای نقطه جوش میزان انتقال جرم از قطرات مایع بسیار بالا است. در طول راکتور بالارونده، فاز گاز متشکل از بخار سیال‌ساز و بخارات نفت‌گاز ناشی از تبخیر قطرات مایع خوراک می‌باشد که باعث افزایش دبی فاز گاز و در نتیجه افزایش سرعت دو فاز گاز و جامد می‌شود. با توجه به شکل ملاحظه می‌شود که میزان انتقال جرم از قطرات مایع در ناحیه‌ای از راکتور بالارونده، بالا می‌باشد که این محل ناحیه‌ای است که قطرات مایع در دمای نقطه جوش می‌باشند. همان‌طور که در شکل ۹ مشخص شده بعد از تبخیر کامل قطرات مایع، کسر مولی نفت‌گاز در فاز گاز با توجه به اغتشاش کامل بستر

$k$  عددی ثابت است. این قانون ( $d^2$ ) معمولاً نقطه شروعی برای آنالیز قطرات مایع هیدروکربن می‌باشد. بعد از آن مشخص شد در شرایطی که انتقال حرارت جابجایی نقش غالب را دارا باشد، زمان عمر قطره با توانی از  $1/5$  تا  $1/1$  متناسب می‌باشد. در این تحقیق با توجه به نتایج مدل‌سازی CFD با برازش منحنی حاصل از داده‌های مدل‌سازی، رابطه دقیقی برای زمان عمر قطره به دست آمد:

$$\left(\frac{d}{d_0}\right)^{1.481} = -6.406t + 0.999 \quad (12)$$

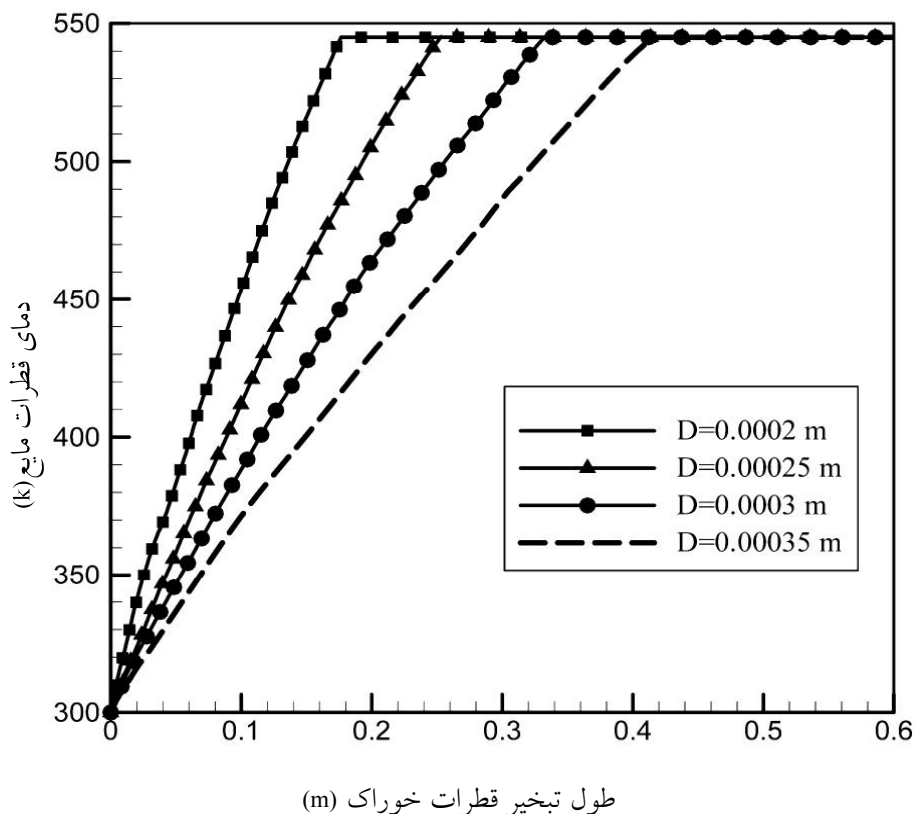
شکل ۸، تغییرات دمایی قطرات مایع در طول راکتور بالارونده را نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که زمان گرم شدن قطرات مایع خیلی سریع بوده و عمل انتقال حرارت به قطرات مایع عامل محدود کننده در راکتور بالارونده نمی‌باشد. قطرات مایع حداکثر با طی  $0.4$  متر در طول راکتور بالارونده به دمای نقطه جوش می‌رسند که این فاصله متناسب با قطر اولیه قطرات خوراک می‌باشد. همچنین ملاحظه می‌شود که با افزایش قطر اولیه قطره مایع، زمان رسیدن به نقطه جوش بیشتر می‌شود و پس از

سیال در سطح مقطع بستر، یکنواخت می‌باشد.

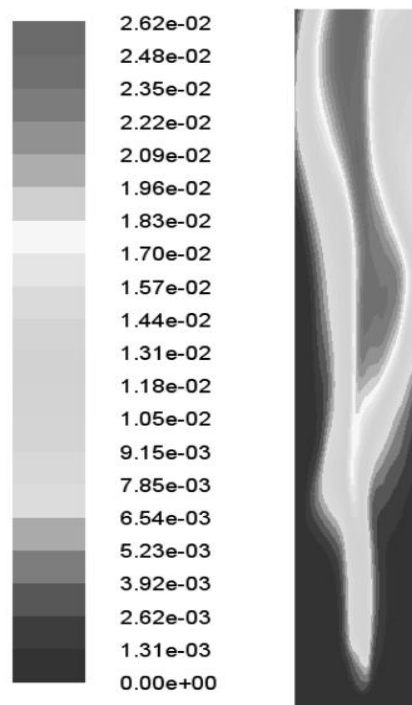
### نتیجه‌گیری

به دلیل اهمیت هیدرودینامیک راکتور بالارونده در طراحی و بررسی عملکرد فرایند FCC به‌عنوان یکی از فرایندهای بسیار متداول در تبدیل برش‌های سنگین نفت به محصولات با ارزش، در این تحقیق هیدرودینامیک و انتقال حرارت بستر سیال گاز-مایع-جامد در راکتور بالارونده واحد FCC با استفاده از روش‌های CFD در حالت سه‌بعدی شبیه‌سازی شد. در این مطالعه توجه ویژه‌ای به ناحیه مخلوط شدن قطرات مایع با فازهای گاز-جامد که تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر عملکرد فرایند FCC دارد، معطوف شده است. نتایج شبیه‌سازی هیدرودینامیکی جریان توربولنس گاز-جامد با داده‌های تجربی موجود معتبرسازی شد و نتایج قابل قبولی از مقایسه داده‌های پیش‌بینی شده توسط مدل CFD شامل توزیع شعاعی سرعت کاتالیست و فاز گاز با داده‌های تجربی متناظر به دست آمد. توزیع کسر

حجمی فازها، مقادیر سرعت و دمای ذرات کاتالیست و فاز گاز، همچنین سایر مشخصه‌های هیدرودینامیکی دو فاز گاز و جامد در طول راکتور بالارونده و همچنین تغییرات دمایی و تغییر قطر قطرات مایع در راکتور بالارونده به دست آمدند. نتایج مدل‌سازی نشان می‌دهد که قطرات مایع با طی مسافتی کم در طول راکتور بالارونده گرم می‌شوند و عمل انتقال حرارت به قطرات مایع، عامل محدود کننده در راکتور بالارونده نمی‌باشد. در مرحله تبخیر مقدار کمی از قطره تبخیر می‌شود و پس از رسیدن به دمای نقطه جوش، قطر قطره با شدت کاهش پیدا می‌کند و کل قطره مایع تبخیر می‌شود. با توجه به نتایج مدل‌سازی CFD، رابطه دقیقی برای زمان عمر قطره پیشنهاد شده است که از روابط ارائه شده در متون علمی تبعیت می‌کند. نتایج حاصل از مدل نشان می‌دهد که بعد از تبخیر کامل قطرات مایع، کسر مولی نفت‌گاز در فاز گاز با توجه به اغتشاش کامل بستر سیال در سطح مقطع بستر یکنواخت می‌باشد.



شکل ۸- تغییرات دمایی قطرات خوراک مایع در طول راکتور بالارونده



شکل ۹- تغییرات کسر جرمی قطرات نفت‌گاز تبخیر شده در فاز گاز

علائم و نشانه‌ها	
$k$ : انرژی سینتیک توربولانس $K$ : ضریب انتقال جرم $\Pi$ : تاثیر آشفته‌گی فاز پراکنده بر فاز پیوسته $Nu$ : عدد ناسلت $T_p$ : دمای قطره، $Pr$ : عدد پرانتل $Sc$ : عدد اشمیت $M_i$ : وزن مولکولی جزء $i$ $T_{bp}$ : دمای نقطه جوش قطره	$G_{kg}$ : ترم تولید انرژی سینتیک توربولانس $\varepsilon$ : نرخ اتلاف انرژی سینتیک توربولانس $R_e$ : عدد رینولدز $T_{vap}$ : دمای تبخیر $F_{V0}$ : کسر جرمی جزء فرار $D_{i,m}$ : ضریب نفوذ بخار در بالک $D_D$ : قطر قطره $m_D$ : جرم قطره

#### منابع

- [1] Sadeghbeigi, R., *Fluid Catalytic Cracking Handbook*, 1<sup>th</sup> Ed, Gulf Professional Publishing, 2000.
- [2] Chen, Y.M., "Recent advances in FCC technology", *Powder Technology*, Vol. 163, pp. 2–8, 2006.
- [3] Kunni, D., & Levenspiel, O., *Fluidization engineering*, 2<sup>th</sup> Ed, Butterworth-Heinemann, 1990.
- [4] Ranade, V.V., *Computational flow modeling for chemical reactor engineering*, 1<sup>th</sup> Ed, Academic press, 2002.
- [5] Goldschmidt, M.J.V., Beetstra, R., & Kuipers, J.A.M., "Hydrodynamic modeling of dense gas-fluidized beds: comparison and validation of 3D discrete particle and continuum models", *Powder Technology*, Vol. 142, No. 1, pp. 23–47, 2004.
- [6] Chiesa, M., Mathiesen, V., Melheim, J.A., & Halvorsen, B., "Numerical simulation of particulate flow by the Eulerian-Lagrangian and the Eulerian-Eulerian approach with application to a fluidized bed", *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 29, No. 2, pp. 291-304, 2005.

- [7] Van der Hoef, M.A., Sint Annaland, M.V., & Kuipers, J.A.M., "Computational fluid dynamics for dense gas–solid fluidized beds: a multi-scale modeling strategy", *Chemical Engineering Science*, Vol. 59, pp. 5157–5165, 2004.
- [8] Yang, N., Wang, W., Ge, W., & Li, J., "CFD simulation of concurrent-up gas–solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 96, pp. 71–80, 2003.
- [9] Mathiesen, V., Solberg, T., & Hjertager, B.H., "Predictions of gas/particle flow with an Eulerian model including a realistic particle size distribution", *Powder Technology*, Vol. 112, pp. 34–45, 2000.
- [10] Hansen, K.G., Ibsen, C.H., Solberg, T., & Hjertager, B., "Eulerian/Eulerian CFD simulation of a cold flowing FCC Riser", *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, Vol. 1, pp. 1-15, 2003.
- [11] McKeen, T., & Pugsley, T., "Simulation and experimental validation of a freely bubbling bed of FCC catalyst", *Powder Technology*, Vol. 129, pp. 139–152, 2003.
- [12] Behjat, Y., Shahhosseini, S., & Hashemabadi, S.H., "CFD modeling of hydrodynamic and heat transfer in fluidized bed reactors", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 35, pp. 357–368, 2008.
- [13] Zimmermann, S., & Taghipour, F., "CFD modeling of the hydrodynamics and reaction kinetics of FCC fluidized-bed reactors", *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 44, pp. 9818-9827, 2005.
- [14] Benyahia, S., Arastoopour, H., Knowlton, T.M., & Massah, H., "Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase", *Powder Technology*, Vol. 112, pp. 24–33, 2000.
- [15] Jiradilok, V., Gidaspow, D., Damronglerd, S., Koves, W.J., & Mostofi, R., "Kinetic theory based CFD simulation of turbulent fluidization of FCC particles in a riser", *Chemical Engineering Science*, Vol. 61, pp. 5544 – 5559, 2006.
- [16] Huilin, L., Gidaspow, D., Bouillard, J., & Wentie, L., "Hydrodynamic simulation of gas–solid flow in a riser using kinetic theory of granular flow", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 95, pp. 1-13, 2003.
- [17] Gao, J., Xu, C., Lin, S., Yang, G., & Guo, Y., "Advanced model for turbulent gas–solid flow and reaction in FCC riser reactors", *AIChE Journal*, Vol. 45, No. 5, pp. 1095-1113, 1999.
- [18] Benyahia, S., Ortiz, A.G., & Paredes, J.I.P., "Numerical analysis of a reacting gas/solid flow in the riser section of an industrial fluid catalytic cracking unit", *International journal of chemical reactor engineering*, Vol. 1, pp. 1-14, 2003.
- [19] Novia, N., Ray, M.S., & Pareek, V., "Three-dimensional hydrodynamics and reaction kinetics analysis in FCC riser reactors", *Chemical Product and Process Modeling*, Vol. 2, No. 2, pp. 1-19, 2007.
- [20] Chang, S.L., Lottes, S.A., Zhou, C.Q., Bowman, B.J., & Petrick, M., "Numerical study of spray injection effects on the heat transfer and product yields of FCC riser reactors", *Journal of Heat Transfer*, Vol. 123, pp. 544-555, 2001.
- [21] Nayak, S.V., Joshi, S.L., & Ranade, V.V., "Modeling of vaporization and cracking of liquid oil injected in a gas–solid riser", *Chemical Engineering Science*, Vol. 60, pp. 6049 – 6066, 2005.
- [22] Patankar, S.V., *Numerical heat transfer and fluid flow*, McGraw-Hill, 1980.
- [23]- Versteeg, & H.K., Malalasekera, W., "An introduction to computational fluid dynamics", The finite vol method, 1<sup>th</sup> Ed., Longman scientific & Technical, 1995.
- [24] Yang, Y.L., *Experimental and theoretical studies on hHydrodynamics in cocurrent upward and downward circulating fluidized beds*, Ph.D. thesis, Tsinghua University, Beijing, China, 1991.
- [25] Law, C.K., "Recent advances in droplet vaporization and combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 8, pp. 171-201, 1982.