

شبیه‌سازی CFD هیدرودینامیک یک راکتور صوتی جهت

بالاترین شدت کاویتاسیون (کاوک‌زایی) صوتی

شهرام نیازی، سید حسن هاشم آبادی*

تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی، آزمایشگاه تحقیقاتی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)

پیام نگار: Hashemabadi@iust.ac.ir

چکیده

در سال‌های اخیر استفاده از انرژی تولیدی در انرژی متلashی شدن میکرو حباب‌های کاوک‌زایی صوتی^۱، در فرایندهای شیمیایی از جمله ارتقای کیفیت نفت خام بسیار مورد توجه قرار گرفته است. برای دستیابی به بیشترین بازدهی باید انرژی پارامترهای مختلف فیزیکی سیستم راکتور صوتی بر میزان میکروحباب‌های کاوک‌زایی و متلashی شدن آنها مشخص گردد. در این مطالعه با شبیه‌سازی CFD انتشار امواج فراصوت^۲ در توده سیال پیش‌بینی مناسبی از مکان‌های فعال برای ایجاد حباب کاوک‌زایی و تأثیر پارامترهای مختلف هندسی بر بازدهی سیستم راکتور صوتی و کاوک‌زایی صوتی ارائه شده است. برای مولد موج صوتی با قطر ۱۳ mm در عمق‌های مختلفی از سیال شبیه سازی‌ها تکرار و تأثیر عمق مولد صوت در سیال روی توزیع فشار در راکتور صوتی بررسی گردید. مقایسه نتایج شبیه‌سازی عددی انطباق خوبی با نتایج آزمایشگاهی موجود نشان می‌دهد. لذا با استفاده از شبیه‌سازی CFD راکتورهای صوتی، شرایط بهینه سیستم برای بالاترین کاوک‌زایی صوتی و بیشترین انرژی تولیدی مشخص می‌گردد.

کلمات کلیدی: راکتورهای صوتی، شبیه‌سازی CFD، کاوک‌زایی صوتی، ارتقای کیفیت نفت خام

استخراجی در سراسر جهان صورت گرفته است. به طور کلی این

۱- مقدمه

فرایندهای جدید را فرایندهای کراکینگ سرد^۳ می‌نامند که با توجه به فرایند و نوع منبع انرژی لازم برای شکست پیوندهای مولکولی به دسته‌های زیر تقسیم می‌شوند:

فرایندهای شیمیایی به کمک موج صوتی^۴

- تابش
- فرایندهای زیست‌شناختی
- صافی‌های دو فلزی^۵
- پلاسمای سرد
- کاوک‌زایی

فرایندهای زیاد پالایش نفت خام با این روش‌ها، نیاز به فرایندهای جدید پُر بازده و ارزان را بیشتر و بیشتر می‌کند. از این‌روه امروزه تلاش‌های گستره‌های برای طراحی فرایندهای جدید و استفاده از منابع انرژی مناسبتر و ارزان‌تر برای بهبود کیفیت نفت خام

3. Cold Cracking

4. Chemical Assisted Ultrasound

5. Intermetallic Filters

1. Acoustic Cavitation
2. Ultrasonic

اطرافش خواهد شد. مانند شستشو توسط امواج فرacoصویی که آلودگی های روی سطوح را با جت های کاواکزایی و خوردگی حذف می کند. برای دستیابی به بیشترین بازدهی و بالاترین شدت کاواکزایی، باید اثر پارامترهای مختلف فیزیکی سیستم راکتور صوتی بر هیدرودینامیک راکتور صوتی و توزیع فشار در راکتور و در نهایت دینامیک میکروحباب های کاواکزایی و متلاشی شدن آنها مشخص گردد. در این راستا درسال های اخیر تحقیقاتی در زمینه شیوه سازی انتشار امواج صوتی در توده مایع و پیش بینی توزیع فشار در راکتور بمنظور اعمال بالاترین شدت کاواکزایی صوتی صورت گرفته است [۱۰-۳]. در این تحقیق برای اعتبار سنجی نتایج شبیه سازی، نواحی فعال کاواکزایی (وجود حباب های ریز کاواکزایی) با نواحی دارای کمترین فشار (حاصل از شبیه سازی CFD) مقایسه شده است.

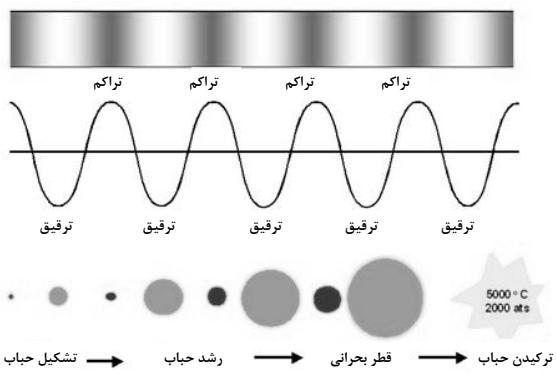
در ادامه، مبانی امواج صوتی و اصول انتشار این امواج در توده مایع و چگونگی تغییرات فشار مایع بر اثر انتشار این امواج مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- مبانی امواج صوتی و معادله حاکم بر انتشار امواج صوتی، امواج مکانیکی طولی (جابه جایی ذرات در امتداد پیشروی موج) هستند. این امواج می توانند در جامدات، مایعات و گازها منتشر شوند. ذرات مادی منتقل کننده این امواج، در راستای انتشار موج نوسان می کنند. امواج مکانیکی طولی در گستره وسیعی از بسامدها به وجود می آیند و در این میان بسامدهای امواج صوتی در محدوده ای قرار گرفته اند که می توانند گوش و مغز انسان را برای شنیدن تحريك کنند. این محدوده تقریباً 20 kHz تا حدود 20 kHz است و گستره شنیده شدنی نامیده می شود. امواج مکانیکی طولی را که بسامدشان زیر گستره شنیده شدنی باشد امواج فرو صوتی، و آنهایی که فرکانس آنها بالای این گستره باشد، امواج فرacoصویی گویند.

برای به دست آوردن توزیع فشار ایجاد شده در توده سیال در اثر انتشار امواج صوتی، باید معادله امواج صوتی حل شود. در فیزیک حل معادله امواج صوتی پیشروی موج را در سیال مشخص می کند. معادله امواج صوتی به صورت معادله دیفرانسیل جزیی درجه دوم است. این معادله تابعیت فشار صوتی^۱ را با مکان و زمان توصیف می کند. در

یکی از روش های بسیار مؤثر و کارآمد در ارتقای کیفیت نفت خام سنگین استفاده از انرژی تولیدی توسط پدیده کاواکزایی صوتی برای شکستن پیوندهای مختلف بین مولکول های موجود در نفت خام می باشد.

به طور کلی می توان تأثیرات کاواکزایی صوتی را توسط رشد، نوسان و انفجار میکروحباب ها در محیط مورد نظر خلاصه کرد. در این نوع کاواکزایی، تغییرات فشار در مایع بر اثر انتشار امواج صوتی معمولاً فرا صوت ($16\text{ kHz} - 100\text{ MHz}$) به وجود می آیند.



شکل ۱- انبساط، تراکم و متلاشی شدن حباب در اثر چرخه های فشاری موج صوتی [۲]

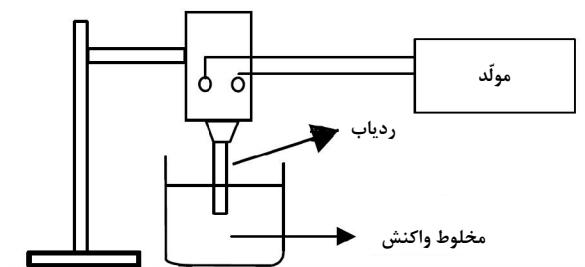
امواج صوتی با فرکانس های بالای فرacoصویی به وسیله مبدل پیزوالکتریک تولید صدا ایجاد می شوند. این امواج، دامنه و فرکانس بالا و میدان فشاری متناوب ایجاد می کنند و در نتیجه قسمتی از مایع در معرض چرخه های فشار بالا و پایین قرار می گیرد که اگر دامنه شان به اندازه کافی بزرگ باشد ممکن است به کاواکزایی و انفجار حباب بینجامد.

شکل (۱) مراحل انبساط و تراکم حباب و در نهایت انفجار آن را در اثر سیکل های فشاری موج صوتی نشان می دهد. یک حباب می تواند در نیم چرخه های ایجاد شده توسط میدان صوتی رشد کند. از طریق نفوذ یک طرفه، بخار و گاز به درون حباب منتقل می شود تا اندازه حباب به مقدار بحرانی اش برسد و حباب متلاشی شود. محتويات درون حباب به دلیل شرایط شدید محلی به سرعت فشرده می شوند. در محل انفجار، دما به بیشتر از 5000°C و فشار به چند صد اتمسفر می رسد و منجر به تأثیرات فیزیکی و شیمیایی در سیال

1. Acoustic Pressure

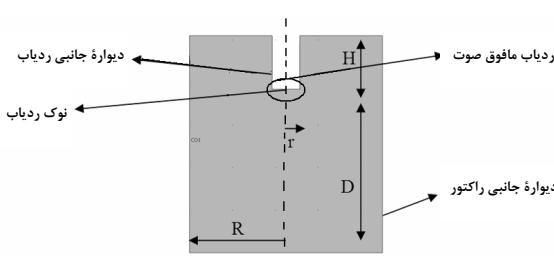
یک پروب (ردیاب) مافوق صوت^۳ به منظور تولید موج صوتی با فرکانس و توان مشخص در عمق مشخصی از آب قرار می‌گیرد.

شکل (۲) راکتور صوتی^۴ مورد نظر را نشان می‌دهد.



شکل ۲- سیستم راکتور صوتی

با تنظیم کردن توان و فرکانس مولد موج صوتی، امواج در راکتور پیشروی کرده و چرخه‌های تراکم و ترقیق را در سیال به وجود می‌آورند. همانطور که قبلاً اشاره شد توزیع فشار صوتی ایجاد شده در سیال با حل معادله موج (معادله (۴)) و استفاده از شرایط مرزی مناسب مشخص خواهد شد.



شکل ۳- دامنه محاسباتی ایجاد شده در نرم افزار

به همین منظور دامنه محاسباتی متناسب با راکتور صوتی مورد نظر ایجاد شده است. شکل (۳) دامنه محاسباتی ایجاد شده را نشان می‌دهد.

چگالی آب ($\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) و سرعت صوت در آب، ($c = 1500 \text{ m/s}$) قرار داده شده است. گام بعدی انتخاب شرایط مرزی مناسب با فیزیک سیستم مورد نظر است. بدین منظور تمامی دیوارهای راکتور را منعکس کننده کامل^۵ موج صوتی (یعنی شرط مرزی $\frac{\partial p}{\partial n} = 0$)، دیوارهای جانبی ردیاب با شرط $\frac{\partial p}{\partial n} = 0$ و نوک^۶ آن به صورت

مختصات سه بعدی معادله موج به شکل زیر تعریف می‌شود [۱۰-۳]:

$$\nabla \left(\frac{1}{\rho} \nabla P \right) - \frac{1}{\rho c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

با فرض ثابت بودن چگالی:

$$\nabla^2 P - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

با در نظر گرفتن تابعیت فشار صوتی با زمان به صورت هارمونیک داریم:

$$P(r, t) = p(r) e^{i \omega t} \quad (3)$$

در نتیجه تابعیت فشار صوتی ایجاد شده با مکان، با جایگذاری معادله (۳) در معادله (۲) به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\nabla \left(\frac{1}{\rho} \nabla P \right) - \frac{\omega^2}{\rho c^2} P = 0 \quad (4)$$

معادله (۴) به معادله هلmholtz^۷ مشهور است. با حل این معادله همگن، توزیع فشار در دامنه محاسباتی مورد نظر بدست می‌آید. برای حل معادله هلmholtz از روش عددی المان محدود و نرم افزار FEMLAB 2.3 استفاده شده است.

در حل این معادله دقت روش عددی به طور قابل ملاحظه‌ای وابسته به عدد موج ($k = \omega/c$) می‌باشد. در عده‌های موج بزرگ، حل، نوسانی خواهد بود، بنابراین باید اندازه گام منفصل سازی^۸ (h) به اندازه کافی ریز انتخاب گردد به طوری که حاصل ضرب عدد موج (k) و فاصله مکانی گره‌های محاسباتی (h) برابر مقدار ثابتی باشد. به این ترتیب برای اعداد موج بالاتر، مشبندی را به اندازه کافی ریز می‌کنیم [۳-۷].

۳- شبیه‌سازی CFD یک راکتور صوتی

سیستم مورد بررسی، یک راکتور استوانه‌ای ناپیوسته پر از آب است.

1. Helmholtz Equation
2. Discretisation Step Size

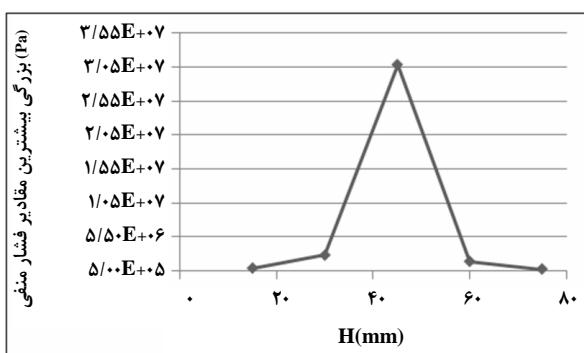
3. Ultrasonic Probe

4. Sono-reactor

5. Sound Soft Boundary

6. Tip

می‌گردد. به همین منظور برای بدست آوردن نسبت بهینه ابعاد راکتور شبیه‌سازی‌هایی به ترتیب زیر انجام شد. راکتوری به ارتفاع ۸۰mm و قطر ۸۵mm با مولد موج صوتی به توان ۵۰ وات و فرکانسی برابر با ۲۰kHz در نظر گرفته شد. یکی از پارامترهای مهم در توزیع فشار و شدت فراصوت در راکتور میزان فرو رفتگی ردیاب در سیال یا مقدار H است. برای ردیابی با قطر ۱۳mm در مقادیر مختلف H شبیه‌سازی‌ها تکرار و تأثیر عمق ردیاب در سیال بر روی توزیع فشار در راکتور بررسی گردید. در شکل (۴) تغییرات مقادیر بزرگی فشار منفی ایجاد شده در راکتور نسبت به عمق ردیاب در توده آب نشان داده شده است.



شکل ۴- بزرگترین مقدار فشار منفی در راکتور با توان ۵۰W، ۲۰kHz در عمق‌های مختلف ردیاب

با توجه به نتایج شبیه‌سازی و مقایسه شدتهای فراصوت ایجاد شده در عمق‌های مختلف ردیاب در سیال (شکل (۴)), در می‌یابیم که با قرار دادن ردیاب در عمق ۴۵mm سیال، بیشترین مقدار شدت فراصوت را در بیشترین حجم راکتور خواهیم داشت. شکل (۵) توزیع فشار صوتی در راکتور با ابعاد هندسی بهینه را نشان می‌دهد. فراصوت را در راکتور با ابعاد هندسی بهینه که فشار منفی است، با توجه به نتایج بدست آمده، در مکان‌هایی که فشار منفی است، بیشترین امکان وقوع کاواکزایی و تشکیل حباب‌های ریز وجود دارد. هر چه این نواحی بزرگتر و فشار کمتر باشد، کاواکزایی و تشکیل حباب شدت بیشتری خواهد داشت و در نتیجه متلاشی شدن این حباب‌ها شدیدتر بوده و بازدهی راکتور صوتی بالاتر می‌رود. با استفاده از این توزیع فشار و با توجه به معادله (۶) می‌توان توزیع شدت فراصوت ایجاد شده در راکتور را بدست آورد. شکل (۶) توزیع شدت فراصوت در راکتور در توان ۵۰W، فرکانس ۲۰kHz و $H=45$ mm را نشان می‌دهد.

شرط فشار ثابت ($p = p_0$) در نظر گرفته شده است. فشار p_0 فشاری است که مولد موج صوتی با توجه به مقدار توانش در نوک ردیاب ایجاد می‌کند و از طریق سطح نوک ردیاب این فشار صوتی در توده سیال اعمال می‌شود. رابطه بین p_0 و توان مولد موج به صورت زیر است:

$$I_{US} = (P_{US}/A) = (p_0^2/2\rho c) \quad (5)$$

که در آن A مساحت نوک پروب، P_{US} توان موج فراصوت، ρ چگالی سیال و c سرعت صوت در سیال است. I_{US} شدت فراصوت^۱ نام دارد و واحد آن، وات بر متر مربع می‌باشد. با استفاده از معادله (۵) می‌توان با توجه به توان مولد (P_{US}) مقدار فشار صوتی p_0 را در شرط مرزی نوک ردیاب محاسبه و تنظیم کرد. گام بعدی در مدل سازی راکتور صوتی مش بندی دامنه محاسباتی است (به گونه‌ای که حاصلضرب عدد موج k در فاصله گرهای محاسباتی h ، مقدار ثابتی باشد). پس از مش بندی مناسب، معادلات با در نظر گرفتن تابعیت هارمونیک فشار صوتی با زمان حل می‌شوند. پس از حل، توزیع فشار صوتی اعمال شده توسط مولد در دامنه محاسباتی مشخص خواهد شد. بنابراین در هر نقطه از دامنه محاسباتی با توجه به فشارش، شدت فراصوت با استفاده از معادله (۶) تعیین می‌شود.

$$I(r) = p(r)^2/2\rho c \quad (6)$$

هر چه شدت فرا صوت ایجاد شده بیشتر و در حجم بیشتری از دامنه محاسباتی اعمال شود، بازدهی فرایند در راکتور صوتی بالاتر خواهد بود زیرا حجم فعال و تعداد مکان‌های با فشار منفی بزرگ در سیال بیشتر شده و در نتیجه امکان وقوع کاواکزایی و انرژی تولیدی بالاتر می‌رود.

۴- بحث و تجزیه و تحلیل نتایج

آنچه از شبیه‌سازی راکتور صوتی مشخص شد این است که توزیع فشار صوتی اعمال شده در سیال شدیداً به هندسه راکتور وابسته است. در نتیجه به ازای نسبت معینی از ابعاد راکتور (D, H) در شکل (۳)، بالاترین شدت در حجم بزرگتری از راکتور ایجاد

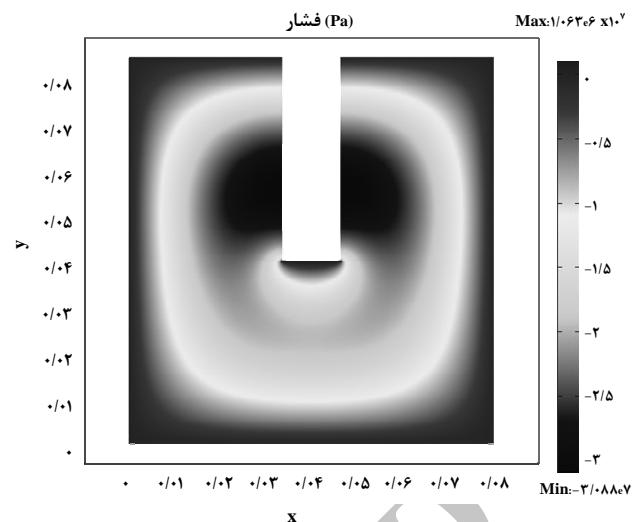
1. Ultrasound Intensity

۴-۱ اعتبار سنجی نتایج

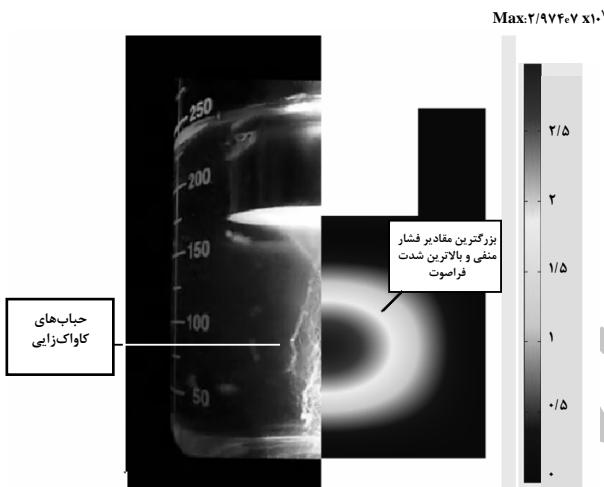
در ادامه برای حصول اطمینان از صحت نتایج شبیه‌سازی عددی، دو سیستم مختلف از راکتورهای صوتی شبیه‌سازی و با نتایج آزمایشگاهی گزارش شده [۱۳] و [۱۴] مقایسه شده‌اند.

الف) شبیه‌سازی راکتور صوتی شرکت Industrial Sonomechanics, LLC(ISM)

در این راکتور 250 mm سی از مولد صوت با توان 2 kW و با فرکانس 22 kHz با ردیاب از نوع Barbell Horn با قطر 25 mm برای ایجاد کواکزایی در آب، استفاده شده است. شکل (۷) مقایسه‌ای از توزیع شدت صوتی پیش‌بینی شده توسط شبیه‌سازی CFD (با 29824 مش و درجه آزادی 193×60) و توزیع مکان‌های فعال کواکزایی حاصل از آزمایش را نشان می‌دهد.



شکل ۵- توزیع فشار ناشی از موج فراصوت در راکتور در توان 50 W ، فرکانس 20 kHz و $H=45\text{ mm}$

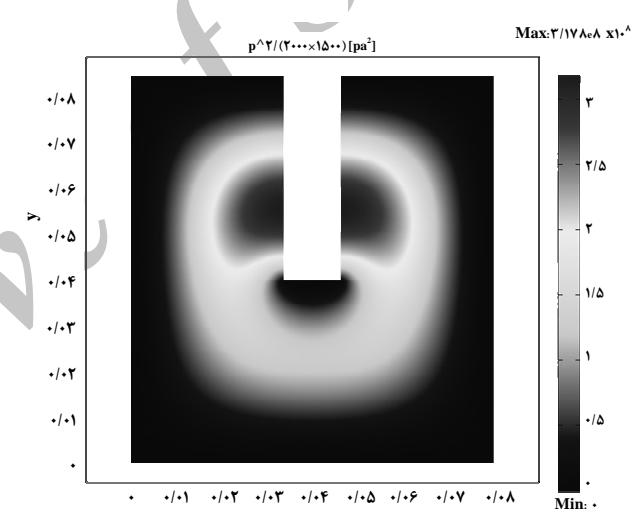


شکل ۶- توزیع شدت فراصوت در راکتور در توان 2000 W و فرکانس 22 kHz و مقایسه با راکتوری با همان اندازه [۱۳]

همانطور که از شکل (۷) مشخص است نتایج شبیه‌سازی توانسته است به خوبی محل ایجاد کواکزایی در را در تصویر نشان داده شده از کار آزمایشگاهی (نیمه سمت چپ) پیش‌بینی کند.

ب) شبیه‌سازی راکتور صوتی شرکت Hielscher - Ultrasound Technology

راکتور صوتی مورد استفاده، استوانه‌ای از جنس شیشه با قطر 150 mm و ارتفاع 435 mm پر از آب است. مولد صوت، ردیاب فرا صوت از نوع UIP2000 به قطر 85 mm (و قطر نوک 20 mm)، توان 2 kW و فرکانس 20 kHz می‌باشد که در حدود 250 mm در آب

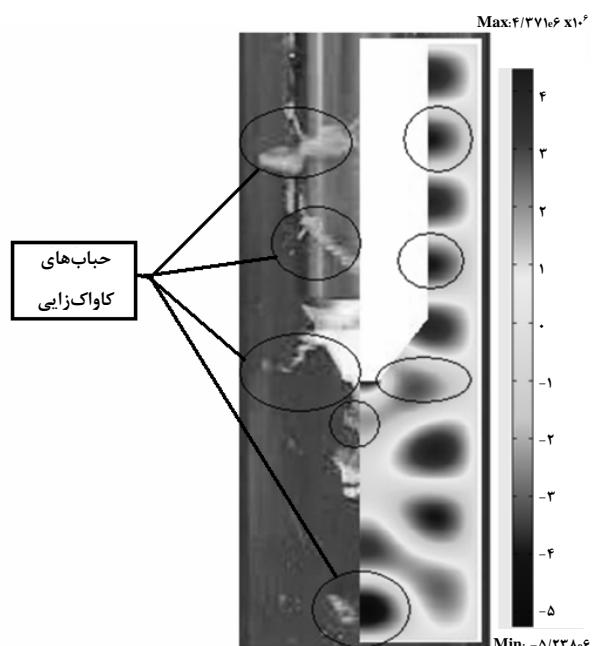


شکل ۷- توزیع شدت فراصوت در راکتور در توان 50 W ، فرکانس 20 kHz و $H=45\text{ mm}$

با توجه به شکل (۶) در نقاطی که بیشترین شدت فراصوت اعمال شده است، بیشترین احتمال وقوع پدیده کواکزایی وجود خواهد داشت. بنابراین ابعادی از هندسه راکتور مطلوب است که بیشترین شدت فراصوت را در بیشترین حجم راکتور ایجاد کند. در نتیجه، بیشترین تعداد انفجار حباب‌های کواکزایی و بالاترین مقدار تولید انرژی به صورت نقطه‌ای در توده سیال را خواهیم داشت. البته لازم به ذکر است که برای ایجاد حباب باید فشار به حد کافی (با توجه به خصوصیات فیزیکی سیال) پایین باشد.

این فرایندها در صنعت پالایش نفت می‌تواند بسیار کارگشا و مفید باشد. در فرایندهای کاواکزایی صوتی انرژی مورد نیاز برای شکست پیوندهای بین مولکول‌های نفت خام، از انفجار حباب‌های ریز ناشی از کاواکزایی تأمین می‌شود. بازدهی راکتورهای صوتی شدیداً به هندسه راکتور، مشخصات هندسی و محل قرارگیری پروب در راکتور و خصوصیات ترموفیزیکی سیال وابسته است. بنابراین، ابعادی از هندسه راکتور مطلوب است که بیشترین شدت فراصوت را در بیشترین حجم از راکتور ایجاد کند. در این تحقیق با شبیه‌سازی CFD انتشار موج در توده سیال، توزیع فشار و شدت فراصوت در راکتور پیش‌بینی شد و می‌توان با مقایسه نتایج، اثر پارامترهای مختلف فیزیک سیستم را در بازدهی روش کاواکزایی پیش‌بینی کرد و در نهایت سیستمی را طراحی کرد که بالاترین حجم فعل کاواکزایی و در نتیجه بیشترین انرژی تولیدی در اثر متلاشی شدن میکروحباب‌ها را داشته باشد. انرژی تولیدی بیشتر توسط کاواکزایی صوتی به شکستن بیشتر پیوندهای بین مولکول‌های نفت خام و در نتیجه ارتقای کیفیت بیشتر آن می‌انجامد.

موجود در راکتور فرو رفته است. شکل (۸) مقایسه‌ای از توزیع فشار صوتی پیش‌بینی شده توسط شبیه‌سازی عددی (با ۲۲۳۳۶ مش و درجه آزادی ۴۵۲۲۵) و توزیع مکان‌های فعل کاواکزایی حاصل از آزمایش را نشان می‌دهد.



شکل (۸)- توزیع فشار صوتی حاصل از شبیه‌سازی در راکتور در توان 2kW و فرکانس 20kHz و مقایسه با راکتوری به همان اندازه در مرجع [۱۴]

شکل (۸) بخوبی نشان می‌دهد که در مکان‌هایی که شبیه‌سازی عددی کمترین فشارها را پیش‌بینی کرده است، حباب‌های کاواکزایی نیز تشکیل شده‌اند.

۵- نتیجه‌گیری

روش‌های معمول مورد استفاده در ارتقای کیفیت نفت خام، فرایندهایی کم بازده با شرایط عملیاتی دشوار هستند که هزینه‌های جاری و ثابت بالایی دارند و مشکلات زیست محیطی فراوانی ایجاد می‌کنند. فرایندهای کاواکزایی بهدلیل تولید انرژی زیاد به صورت نقطه‌ای در توده سیال و در عین حال کم هزینگی و نیز بهدلیل انعطاف‌پذیری زیاد در طراحی فرایندها بر این مبنای بسیار مطلوب بوده و از لحاظ زیست محیطی کمترین مضرات را دارند. به کارگیری

- [1] Gogate P. R., Tayal R. K., Pandit A. B., "Cavitation: A technology on the horizon", Current Science, 91, 35-46, (2006).
- [2] Mason T. J., Lorimer J. P., "Applied Sonochemistry", Wiley-VCH, 12-34, Germany (2002).
- [3] Klima J., Ferrer A. F., Garcia J. G., Ludvik J., Saez V., Iniesta J., "Optimization of 20 kHz sonoreactor geometry on the basis of numerical simulation of local ultrasonic intensity and qualitative comparison with experimental results", Ultrasonics Sonochemistry, 14, 19–28, (2007).
- [4] Saez V., Fras-Ferrer A., Iniesta J., Gonzalez-Garcia J., Aldaz A., Riera E., "Characterization of a 20 kHz sonoreactor. part I: analysis of mechanical effects by classical and numerical methods", Ultrasonics sonochemistry, 11, 59–65, (2005).
- [5] Sutkar V. S., Gogate P. R., "Mapping of cavitation activity in high frequency sonochemical reactor", Chemical Engineering Journal, 158, 296–304, (2010).
- [6] Kim H. J., Chi M. H., Hong I. K., "Effect of ultrasound irradiation on solvent extraction process", Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 15, 919–928, (2009).
- [7] Raman V., Abbas A., Joshi S. C., "Mapping Local Cavitation Events in High Intensity Ultrasound Fields", Conference Bangalore, (2006).
- [8] Sutkar V. S., Gogate P.R., "Mapping of cavitation activity in high frequency sonochemical reactor", Chemical Engineering Journal, 158, 296–304, (2010). [9] Moholkar V. S., Sable S. P., Pandit A. B., "Mapping the Cavitation Intensity in an Ultrasonic Bath Using The Acoustic Emission", AIChE Journal, 46, 4, 684-694, (2000).
- [10] Sutkar V. S., Gogate P. R., Csoka L., "Theoretical prediction of cavitation activity distribution in sonochemical reactors", Chemical Engineering Journal, 158, 2, 290-295, (2010).
- [11] Austin D. P., "Method to Upgrade Hydrocarbon mixture", United States Patent, 10/174303, (2003).
- [12] Son Y., Lim M., Khim J., "Investigation of acoustic cavitation energy in a large-scale sonoreactor", Ultrasonics Sonochemistry, 16, 552–556, (2009).
- [13] Industrial Sonomechanics, LLC(ISM), www.Sonomechanics.com.
- [14] Hielscher-Ultrasound Technology, www.Hielscher.com.
- [15] FEMLAB 2.3 User's Guide.