

بررسی انتخاب شبکه‌بندی‌های مختلف و مدل‌های آشفتگی بر نحوه توزیع جریان دو فازی (گاز- مایع) در آکنه‌های منظم با استفاده از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی

مریم وزیری، محمدتقی صادقی*

تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی، آزمایشگاه تحقیقاتی شبیه‌سازی و کنترل فرایند

پیام نگار: sadeghi@iust.ac.ir

چکیده

توزیع جریان دو فازی (گاز- مایع) در آکنه‌های منظم از اهمیت خاصی در انتقال جرم و گرما بین دو فاز برخوردار است. در سال‌های اخیر بررسی این سیستم توسط روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی میسر شده است. در این تحقیق سعی شده است که تأثیر انواع شبکه‌بندی و نیز مدل‌های آشفتگی مختلف بر روی توزیع و کسر حجمی فاز مایع برای آکنه منظم مونترپیک B1250-Y در حالت پایا با استفاده از روش‌هایی بررسی شود. برای مدلسازی سیستم از دیدگاه حجم سیال استفاده شده و انواع شبکه‌بندی‌های مختلف (چهار وجهی و الگوریتم کوپر) و همچنین مدل‌های مختلف آشفتگی $(k-\epsilon)$ استاندارد و $RNG (k-\epsilon)$ و $Realizable (k-\epsilon)$ به‌کار گرفته شده است. معادلات حاصل با استفاده از روش عددی حجم محدود حل شده‌اند. توزیع نامناسب فاز مایع به وسیله مقدار (C_v) و کسر حجمی فاز مایع در سرعت‌های مختلف در شرایط ذکر شده مورد بررسی قرار گرفته و نتایج با داده‌های آزمایشگاهی مراجع مقایسه گردیده‌اند. نتایج حاصل بیانگر تأثیر زیاد انتخاب شبکه‌بندی و مدل‌های آشفتگی مناسب در شبیه‌سازی صحیح هیدرودینامیک آکنه‌های منظم می‌باشد.

کلمات کلیدی: جریان دو فازی، مدل‌های آشفتگی، شبکه‌بندی، حجم سیال، دینامیک سیالات محاسباتی

۱- مقدمه

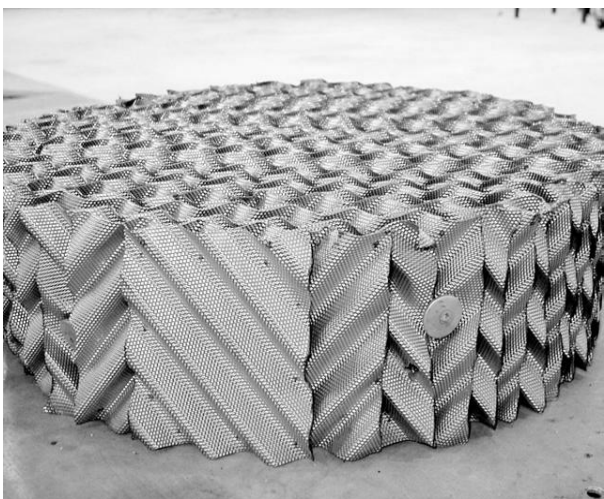
یکی از روش‌های بررسی توزیع مایع، استفاده از روش‌های توموگرافی است که انجام آن مستلزم صرف وقت و هزینه بسیار زیادی می‌باشد [۲]. روش دیگر، استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی^۳ است. دینامیک سیالات محاسباتی علمی است که با استفاده از حل عددی معادلات حاکم بر روی سیستم، پیش‌بینی مناسبی از میدان جریان و سایر پدیده‌های همراه جریان مثل توزیع دما و غلظت را به‌دست می‌دهد [۱۵-۸]. سالزسکا^۴ و همکاران [۲۰۰۳] مدل توسعه یافته CFD جریان دو

از آکنه‌های منظم^۱ به‌طور وسیعی در سیستم‌های مختلف (مایع- بخار) (مثل ستون‌های تقطیر یا جذب، سیستم‌های تصفیه نفت و...) استفاده می‌شود [۱]. سطح زیاد، ضرایب انتقال جرم بالا و افت فشار پایین از ویژگی‌های این آکنه‌ها می‌باشند. آکنه‌های منظم از ورقه- های شیاردار که عموماً از جنس فلز هستند ساخته می‌شوند. در مقایسه با آکنه‌های توده‌ای^۲ متداول، آکنه‌های منظم، افت فشار کمتر، بازدهی جداسازی بیشتر و ظرفیت بالاتری دارند.

3. CFD
4. Szulczewska

1. Structured Packing
2. Dumped Packing

بیشتری بررسی می‌گردد. بنابراین با در نظر گرفتن این نکته که مدلسازی آشفتگی جریان دارای دقت کمتری در شبیه‌سازی محیط متخلخل نسبت به شبیه‌سازی هندسه حقیقی آکنه می‌باشد و نحوه حرکت فاز مایع در هندسه اصلی به واقعیت نزدیک‌تر است، یک مدل سه بعدی در یک واحد سازنده از آکنه، به یک لایه از آکنه که در محیط متخلخل شبیه‌سازی می‌شود برای بررسی ترجیح داده شد. هندسه پیشنهادی برای تحلیل توزیع مایع در شکل (۳) نشان داده شده است.



شکل ۱- طرح اجمالی مونتزپک MontzpakB1-250Y [۲]

فازی ناهمسو در یک کانال از آکنه منظم ملاپک 250-Y^۱ در حالت ناپایا را معرفی کرد [۳]. ون بتن^۲ و همکاران [۲۰۰۷] با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی به تحلیل پراکندگی^۳ فاز مایع در درون ساختارهای ساندویچی متقاطع به روش آزمایشگاهی پرداختند و برای بررسی از دیدگاه (اولرین- اولرین) استفاده کردند [۴].

آکنه مورد بررسی آکنه (مونتزپک B1-250Y)^۴ است که به عنوان آکنه استاندارد دانشگاه دلفت معرفی شده است. با توجه به شکل پیچیده هندسی آکنه‌های منظم، نوع شبکه‌بندی و اندازه آن، همچنین به علت پیچیدگی هیدرودینامیک جریان دو فازی داخل آکنه، انتخاب مدل آشفتگی مناسب برای دستیابی به شبیه‌سازی مناسب از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

۲- شبیه‌سازی هیدرودینامیک آکنه منظم

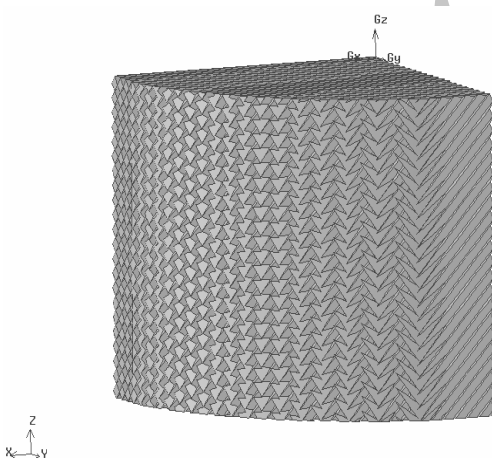
۲-۱ هندسه سیستم

مشخصات هندسی آکنه (مونتزپک B1-250Y) در جدول (۱) ارائه شده است. همچنین طرح اجمالی حقیقی آکنه در شکل (۱) نشان داده شده است. شکل (۲) نشان‌دهنده ربع استوانه آکنه مورد نظر شبیه‌سازی شده با استفاده از نرم‌افزار گمبیت نسخه (۲۶.۳.۶) می‌باشد.

جدول ۱- مشخصات هندسی آکنه مونتزپک B1-250Y [۵]

$a_p (m^2 / m^3)$	$\varepsilon (-)$	h(m)	b(m)	S(m)
۲۴۴	۰/۹۸	۰/۰۱۲۰	۰/۰۲۲۵	۰/۰۱۶۵

a_p : مساحت سطح آکنه، ε : تخلخل آکنه، h : ارتفاع چین خوردگی، b : طول قاعده چین خوردگی، S : طول ضلع چین خوردگی. برای پرهیز از انجام محاسبات بسیار سنگین و زمانبر در یک لایه^۵ آکنه با هندسه حقیقی، یک واحد سازنده (دو ورق) از آکنه منظم در حالت سه بعدی که دارای ابعاد (۲۵cm × ۲۵cm × ۲/۴cm) می‌باشد مورد بررسی قرار گرفت. لازم به ذکر است هر چه مدل شبیه‌سازی شده به آکنه حقیقی نزدیکتر باشد رفتار جریان با دقت



شکل ۲- آکنه شبیه‌سازی شده مونتزپک

MontzpakB1- 250Y

1. Mellapak 250-Y
2. Vanbaten
3. Dispersion
4. MontzpakB1-250Y
5. Element

و با توجه به اینکه عبور جریان فاز مایع بدون هیچ تحمیلی باید صورت گیرد، تا بتوان توزیع مایع را تحلیل نمود و از طرفی اجازه خروج مایع در انتهای آکنه به‌طور طبیعی انجام گرفته و بر روی یک مرز امکان تعریف دو شرط مرزی (برای فاز گاز و فاز مایع) وجود ندارد، قسمت (ب)، تعریف گردید تا در انتهای آن بتوان شرط مرزی خروجی مایع «فشار خروجی» و همچنین شرط مرزی ورودی گاز به‌صورت «سرعت ورودی» گاز را تعریف کرد. با این کار در انتهای آکنه مورد نظر (قبل از قسمت (ب)) توزیع طبیعی فاز مایع برقرار است. برای دیواره‌های مدل نیز شرط مرزی «دیواره جامد» در حالت سرعت صفر برای ذرات در دیواره در نظر گرفته شده و به‌طور کلی شرط مرزی «دیواره» برای محدود کردن نواحی سیال با جامد به کار می‌رود.

لازم به ذکر است که ضخامت فیلم مایع با سرعت فاز مایع طبق مدل اولاجیک^۱ [۵] رابطه مستقیم دارد که با فرمول زیر نشان داده شده است.

$$\delta = \left(\frac{3\mu_L u_{ls}}{\rho_L g a \sin \alpha} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

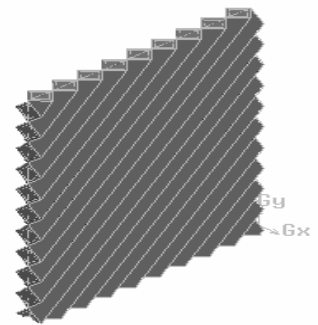
u_{ls} : سرعت ظاهری فاز مایع

μ_L : گرانیوی فاز مایع

ρ_L : چگالی فاز مایع

a : مساحت سطح آکنه

با توجه به این رابطه، برای هر شبیه‌سازی در سرعت‌های مختلف، ضخامت فیلم مایع تغییر می‌کند.

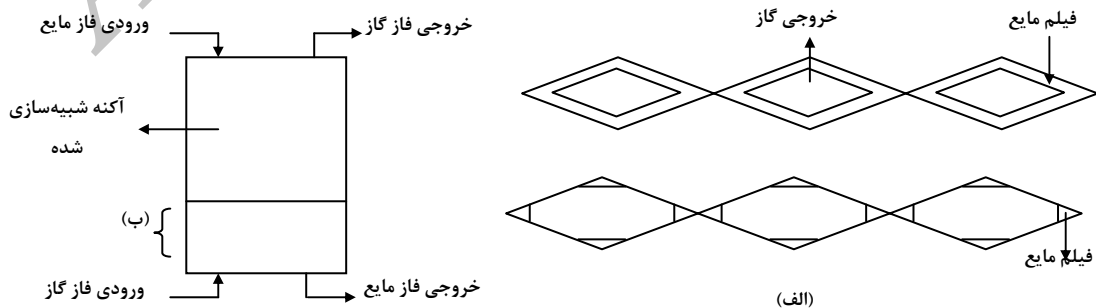


شکل ۳- هندسه پیشنهادی برای تحلیل چگونگی توزیع فاز مایع

۲-۲ شرایط مرزی مورد استفاده برای تحلیل توزیع فاز مایع

آکنه مورد نظر در قسمت وسط برج (نه ابتدای برج و نه انتهای آن) و در محلی که فیلم مایع تشکیل شده است در نظر گرفته می‌شود. در شکل (۴) قسمت (الف)، شرط مرزی ورودی مایع به‌صورت اجمالی نشان داده شده است. از جریان دو فاز (گاز-مایع) در حالت جریان متقابل در این سیستم استفاده شده است. فاز گاز در حالت آشفته و فاز مایع در حالت آرام می‌باشد.

در مرز ورودی مایع، «سرعت ورودی» مایع تعیین شده و در محلی که گاز خارج می‌گردد شرط مرزی «فشار خروجی» برای گاز در نظر گرفته می‌شود. در حالتی که سرعت خروجی جریان هوا به‌صورت دقیق در دست نباشد، استفاده از این شرط مناسب است. در این حالت، متوسط فشار ایستا در خروجی، یک اتمسفر در نظر گرفته شد. انتهای قسمت (ب) نشان‌دهنده شرط مرزی خروجی مایع و ورودی فاز گاز می‌باشد. به علت اینکه شرایط مایع خروجی از قبیل ضخامت فیلم خروجی مایع و سرعت خروج مایع مشخص نمی‌باشد



شکل ۴- شرایط مرزی مورد استفاده برای تحلیل توزیع فاز مایع

(الف) قسمت شرط مرزی ورودی مایع و خروجی گاز در دو حالت شبیه‌سازی شده (ب) شرط مرزی خروجی مایع و ورودی گاز

۳-۲ شبکه‌بندی

ولی نتایج، قابل قبول نبود. بنابراین، با توجه به پیچیدگی هندسه برای شبکه‌بندی، از الگوریتم کوپر^۱ که موجب دقت آنالیز بالا با ارتقای کیفیت شبکه (استفاده از عناصر با کیفیت مکعبی و گوه‌ای) می‌شود استفاده شد.

۳- معادلات حاکم

۳-۱ دیدگاه شبیه‌سازی جریان (گاز- مایع)

زمانی که شکل و فرایندهای جریانی که در نزدیک فصل مشترک رخ می‌دهند، مورد نظر باشد، بایستی از دیدگاه حجم سیال استفاده شود. در این تحقیق، بررسی فصل مشترک دو فاز و چگونگی رفتار فاز مایع در سراسر آکنه مهم است و لذا از دیدگاه حجم سیال^۲ (VOF) برای بررسی استفاده شده است. به‌طور کلی، روش VOF برای حل سیستم‌های چندفازی شامل دو یا چند سیال غیرقابل امتزاج استفاده می‌شود که بررسی موقعیت فصل مشترک آنها مورد نظر می‌باشد. برخی از نیروهای مربوط به فصل مشترک نظیر نیروهای سطحی یا چسبندگی را می‌توان با استفاده از این دیدگاه، به‌طور دقیق مدل کرد [۶].

معادله پیوستگی در رابطه زیر ارائه شده است:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{aq} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (2)$$

در روش VOF علاوه بر معادله پیوستگی، یک سری از معادلات تکانه برای دامنه محاسباتی به‌صورت زیر حل می‌شود:

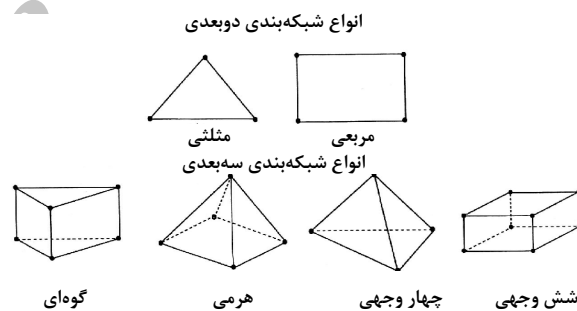
$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \rho g_j + F_j \quad (3)$$

که از خواص مخلوط در معادله تکانه استفاده می‌شود. به‌طور کلی برای یک سیستم n- جزئی، میانگین چگالی کسر حجمی به شکل زیر در می‌آید:

$$\rho = \sum \alpha_q \rho_q \quad (4)$$

1. Cooper
2. Volume of Fluid

در ابتدای یک تحلیل CFD شبکه‌بندی قرار دارد. شبکه، هندسه مورد نظر را در شبیه‌سازی مشخص خواهد نمود. تحلیل شبکه بسیار مهم است. شبکه باید به حد کافی جهت رفع و بیان همه جزئیات جریان، ریز باشد. اما از سوی دیگر ممکن است در حد تجهیزات محاسباتی نباشد. ایجاد شبکه‌بندی مناسب برای حل معادلات حاکم بر مدل یکی از مهم‌ترین بخش‌های مدلسازی است. با یک شبکه‌بندی می‌توان در حل معادلات به یک همگرایی مناسب دست یافت و بالعکس انتخاب نامناسب شبکه می‌تواند باعث ایجاد ناپایداری یا عدم همگرایی مناسب در محاسبات گردد. با ایجاد شبکه، در حقیقت، نگاشت نقاط شبکه از دامنه فیزیکی به دامنه محاسباتی ایجاد می‌گردد. در عملیات شبکه‌بندی یک مدل، ابتدا لبه‌ها شبکه‌بندی می‌شوند، سپس به کمک آنها شبکه برای سطوح و کل حجم ایجاد می‌گردد. انواع مختلفی از شبکه‌های دو بعدی و سه بعدی توسط نرم افزار فلوئنت پذیرفته می‌شود که برخی از آنها در شکل (۵) نشان داده شده است.



شکل ۵- شبکه‌بندی قابل قبول در نرم افزار فلوئنت [۶]

برای انتخاب اندازه مناسب عناصر، باید جواب‌هایی مستقل از اندازه هر عنصر به دست آیند. بدین مفهوم که با تغییر در اندازه عناصر، تغییری در جواب مشاهده نگردد. بدین منظور در این تحقیق، ابتدا مدل‌های مورد نظر توسط عناصر چهار وجهی و شش وجهی با اندازه‌های ۳ و ۴ و ۲ میلی‌متر شبکه‌بندی شدند. با توجه به ارزیابی کیفیت شبکه در نرم‌افزار گمبیت و تعداد عناصر موجود در شبیه‌سازی آکنه با ضخامت فیلم مایع ۰/۲۱ mm، عنصر چهار وجهی به اندازه ۲ میلی‌متر به تعداد ۳۰۱۰۰۰۰ انتخاب شد و مقادیر مختلف از قبیل نحوه توزیع فیلم مایع و C_v محاسبه گردید

یا به صورت کلی برای هر خاصیت ϕ ، در این روش داریم:

$$\phi = \frac{\sum \alpha_k \rho_k \phi_k}{\sum \alpha_k \rho_k} \quad (5)$$

هنگامی که حجم کنترل از فاز ϕ خالی است $\alpha_q = 0$

هنگامی که حجم کنترل از فاز ϕ پر است $\alpha_q = 1$

هنگامی که درصدی از حجم کنترل با فاز ϕ پر شده و بقیه آن با سایر فازها پر شده باشند: $0 < \alpha_q < 1$

ردیابی فصل مشترک بین فازها با حل معادله بقاء برای کسر حجمی فازها در حجم کنترل انجام می‌شود.

برای q امین سیال:

$$\frac{\partial \alpha_q}{\partial t} + u_i \frac{\partial \alpha_q}{\partial x_i} = 0 \quad (6)$$

برای $n-1$ فاز معادله فوق نوشته می‌شود و از طرفی برای فاز n م داریم:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (7)$$

چون حل در حالت پایا صورت می‌گیرد، لذا معادلات به روش مجزاسازی ضمنی^۱ حل می‌شوند. کشش سطحی می‌تواند در جمله‌های جهش فشار در طول سطح تعریف گردد. نیروی سطح را می‌توان به عنوان نیروی حجمی مورد استفاده در نظریه دیورژانس تعریف کرد. این نیروی حجمی در جمله چشمه جای می‌گیرد که به معادله تکانه اضافه می‌گردد و پس از ساده‌سازی به فرم زیر در می‌آید:

$$F_{Vol} = \sigma_{ij} \frac{\rho k_i \nabla \alpha_i}{\frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)} \quad (8)$$

توجه کنید که محاسبه اثرات کشش سطحی در شبکه‌های مثلثی و چهار وجهی دقت لازم را در مقایسه با شبکه‌های شش وجهی (مکعبی) ندارد. ناحیه‌ای که کشش سطحی اثر می‌کند بسیار مهم است و باید با شبکه‌های به صورت شش وجهی باشد.

1. Implicit

زاویه تماسی که سیال با دیواره دارد جهت تنظیم نرمال سطح در سلول‌های نزدیک دیواره به کار می‌رود. این شرایط را شرایط مرزی دینامیک می‌نامند که نتیجه آن تنظیم انحنای سطح در نزدیکی دیواره است. اگر θ_w زاویه تماس در دیواره باشد پس نرمال سطح در سلول مؤثر دیواره به شکل زیر است:

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos \theta_w + \hat{t}_w \sin \theta_w \quad (9)$$

که \hat{n}_w و \hat{t}_w بردارهای واحد نرمال و مماس دیواره می‌باشند. ترکیب این زاویه تماس با نرمال سطح محاسبه شده یک سلول کنار دیواره، انحنای محلی سطح را نشان می‌دهد و این انحنا در تنظیم کردن جمله نیروی بدنه در محاسبات کشش سطحی به کار می‌رود. زاویه تماس θ_w زاویه بین دیواره و مماس بر سطح دیواره می‌باشد.

۳-۲ مدل جریان آشفته

در این تحقیق سه مدل $(k-\varepsilon)$ استاندارد و $(k-\varepsilon)$ RNG و $(k-\varepsilon)$ Realizable مورد بررسی قرار گرفتند، که در ادامه به شرح آنها پرداخته می‌شود:

۳-۲-۱ مدل $(k-\varepsilon)$ استاندارد

در مدل $(k-\varepsilon)$ استاندارد فرض می‌شود که گرانیروی ناشی از آشفتگی μ_t تابعی از انرژی جنبشی k و نرخ پراکندگی انرژی جنبشی ε به صورت زیر است [۶]:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (10)$$

مقادیر C_μ و ε به صورت مستقیم از حل معادلات بقای انرژی جنبشی و نرخ تلفات انرژی جنبشی به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + G_k - \rho \varepsilon \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} G_k - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (12)$$

که در آن $C_{1\varepsilon} = 1/44$, $C_{2\varepsilon} = 1/92$, $C_\mu = 0.09$, $\sigma_k = 1$, $\sigma_\varepsilon = 1/2$ هستند. جمله G در معادلات بالا بیانگر تولید انرژی آشفتگی به صورت زیر است:

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \quad (13)$$

۲-۲-۳ مدل RNG (k-ε)

مدل $RNG - (k - \varepsilon)$ معادلات مشابهی برای ε و k مانند مدل $(k - \varepsilon)$ استاندارد دارد. اما با مقادیر متفاوت در ثابت‌ها بوده و یک جمله اضافی نیز در معادله‌ها وجود دارد. تصحیح‌های محاسبات گرانروی مؤثر بسیار مهم است. گرانروی مؤثر از یک معادله دیفرانسیل جزئی محاسبه می‌شود که شامل اثرات جریان چرخشی نیز می‌باشد. معادله انرژی سینتیکی K در مدل $RNG - (k - \varepsilon)$ به شکل زیر است [۶]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_i}) + \mu_t S^2 - \rho \varepsilon \quad (14)$$

برای ε معادله به شکل زیر می‌باشد:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t S^2 - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R \quad (15)$$

فرم جبری ساده شده معادله μ_{eff} به شکل زیر است:

$$\mu_{eff} = \mu_{mol} \left[1 + \sqrt{\frac{C_\mu}{\mu_{mol}} \frac{k}{\sqrt{\varepsilon}}} \right]^2 \quad (16)$$

ثابت‌های مدل، $C_{1\varepsilon} = 1/42$, $C_{2\varepsilon} = 1/48$, $C_\mu = 0.0845$ هستند.

۳-۲-۳ Realizable (k-ε) مدل

مدل $Realizable (k - \varepsilon)$ یک مدل نسبتاً جدید است و از دو

دیدگاه با مدل $(k - \varepsilon)$ استاندارد تفاوت دارد:

- مدل $Realizable (k - \varepsilon)$ شامل یک فرمولبندی جدید برای گرانروی درهم است.
- برای شدت اتلاف انرژی، ε یک معادله انتقال جدید از یک معادله دقیق مشتق شده است که برای انتقال متوسط مربع نوسانات گردابی استفاده می‌شود.

عبارت "realizable" بدین معنی است که این مدل محدودیت‌های ریاضیاتی خاصی را روی تنش‌های رینولدز اعمال می‌کند که با شرایط فیزیکی جریان‌های درهم سازگار است. نه مدل $k - \varepsilon$ استاندارد و نه مدل $RNG (k - \varepsilon)$ هیچیک $realizable$ نیستند. یک مزیت ضروری از مدل $Realizable (k - \varepsilon)$ این است که شدت گستردگی (وسعت) جت‌های مسطح و گردشی را دقیق‌تر پیش‌بینی می‌کند. همچنین این مدل برای جریان‌هایی که شامل چرخش، گرادیان‌های فشار مخالف قوی، جداسازی و جریان مجدد هستند و جریانهای درون کانال، کارایی‌های عالی فراهم می‌کند.

معادلات انتقال مدل شده برای ε, k در مدل $Realizable (k - \varepsilon)$ عبارتند از [۶]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_{1\varepsilon} S \varepsilon - \rho C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu} \varepsilon} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b + S \varepsilon \quad (18)$$

$$C_1 = \max\left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5}\right], \quad \eta = S \frac{k}{\varepsilon}, \quad S = \sqrt{2S_{ij} S_{ij}} \quad (19)$$

در این معادلات، G_k بیانگر تولید انرژی جنبشی آشفته ناشی از گرادیان سرعت متوسط است. G_b نشان دهنده تولید انرژی جنبشی ناشی از بویانسی (شناوری) است. Y_m بیان‌کننده نسبت انبساط نوسانی در اغتشاش تراکم‌پذیر به شدت پراکندگی کل و C_1, C_2 ثابت‌ها هستند. $\sigma_\varepsilon, \sigma_k$ به ترتیب اعداد پراکتل درهم ε, k

1. Renormalization Group

$$\sigma_{\varepsilon} = 1/2 \sigma_k = 1 C_2 = 1/9 C_{1\varepsilon} = 1/44$$

۳-۳ شرایط عملیاتی سیستم و فرضیات مورد استفاده

در این سیستم، فاز مایع آب و فاز گاز هوا می‌باشد. برای انجام محاسبات مربوط به ضخامت فیلم مایع و سرعت حقیقی مؤثر، از روابط و داده‌های کار اولاجیک و همکاران [۵] و [۷] استفاده شده است.

شرایط عملیاتی مورد استفاده در جدول (۲) آمده است.

جدول ۲- شرایط عملیاتی (آب / هوا)

u_{Gs}	u_{Ge}	u_{ls}	u_{le}
(m/s)	(m/s)	(m/s)	(m/s)
۴/۵۵۴	۶/۹۳۵۰	۰/۰۰۵۵	۰/۱۵۵۰
۲/۲۷	۳/۴۲۱	۰/۰۰۲۷	۰/۰۹۴
۱/۲۵۲	۱/۸۷۲	۰/۰۰۱۵۲	۰/۰۶۴

لازم به ذکر است که در آنکه‌های منظم به جای سرعت ظاهری، از سرعت حقیقی (مؤثر) استفاده می‌شود و رابطه آن عبارت است از:

$$u_{Ge} = \frac{u_{Gs}}{(\varepsilon - h_l) \sin \alpha} \quad (25)$$

$$u_{le} = \frac{u_{ls}}{\varepsilon h_l \sin \alpha} \quad (26)$$

u_{Gs} : سرعت ظاهری فاز گاز

u_{ls} : سرعت ظاهری فاز مایع

u_{Ge} : سرعت حقیقی فاز گاز

u_{le} : سرعت حقیقی فاز مایع

h_l : تجمع مایع

ε : تخلخل

α : زاویه چین خوردگی

هر عملیات شبیه‌سازی نیازمند در نظر گرفتن پاره‌ای فرضیات منطقی و صحیح می‌باشد. در این تحقیق، توضیحات زیر مد نظر قرار گرفته است:

و S_k, S_ε نیز جمله چشمه هستند.

این مدل به‌طور گسترده‌ای برای محدوده وسیعی از جریان‌ها معتبر است. بعضی از آنها عبارتند از: جریان‌های برشی همگن چرخشی، جریان‌های آزاد شامل جت‌ها و لایه‌های اختلاطی، جریان‌های کانالی و لایه مرزی و جریان‌های جدا شده. آن چه که واضح است این است که در همه این موارد، قابلیت این مدل اساساً از مدل $(k - \varepsilon)$ استاندارد بهتر است.

مانند مدل‌های دیگر $(k - \varepsilon)$ ، گرانبوی گردابی از معادله (۹) محاسبه می‌شود. تفاوت بین مدل $(k - \varepsilon)$ Realizable و مدل‌های RNG $(k - \varepsilon)$ این است که C_μ ثابت نیست. این مقدار از معادله زیر محاسبه می‌شود:

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{kU^*}{\varepsilon}} \quad (20)$$

و

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}} \quad (21)$$

و

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\varepsilon_{ijk} \omega_k \quad \text{و} \quad \Omega_{ij} = \overline{\Omega_{ij}} - \varepsilon_{ijk} \omega_k \quad (22)$$

که $\tilde{\Omega}_{ij}$ تنسور متوسط شدت چرخش با سرعت زاویه‌ای ω_k است.

ثابت‌های مدل A_s, A_0 برابرند با

$$A_0 = 4.04, \quad A_s = \sqrt{6} \cos \phi \quad (23)$$

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6}W), \quad W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\tilde{S}^3} \quad (24)$$

$$\tilde{S} = \sqrt{S_{ij}S_{ij}}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

می‌توان دید که C_μ تابعی از کرنش متوسط و شدت‌های چرخش، سرعت زاویه‌ای چرخش سیستم و حوزه‌های آشفته (ε, k) می‌باشد. ثابت‌های مدل، $C_2, \sigma_k, \sigma_\varepsilon$ بدین منظور گنجانده شده‌اند که از کارکرد مناسب مدل در جریان‌های متعارف اطمینان حاصل کنیم. ثابت‌های مدل عبارتند از:

- هیچ واکنش شیمیایی در سیستم انجام نمی‌گیرد.

- صاف در نظر گرفتن سطح صفحات آکنه

- شرایط دمایی ثابت برای مدل فرض شده و بنابراین نیازی به در نظر گرفتن معادلات انرژی نمی‌باشد.

- محل استقرار آکنه مورد نظر در برج آکنده، در یکی از عناصر وسط برج می‌باشد، به عبارتی آکنه مورد نظر در ابتدا یا انتهای برج قرار نمی‌گیرد.

۴- توزیع نامناسب فاز مایع

مشکلات زیاد درون برجهای آکنده، مربوط به توزیع نامناسب مایع در برج است. چنانچه توزیع مایع در برج به صورت یکنواخت و مناسب انجام نشود، قسمتی از بستر بدون آغشته شدن به مایع در معرض جریان گاز قرار خواهد گرفت. در این صورت، این قسمت از بستر اثری در انتقال جرم نخواهد داشت و به خاطر عدم تماس بین فاز مایع و گاز، بازدهی انتقال جرم کاهش می‌یابد.

توزیع نامناسب مایع در برجهای آکنده سبب نتایج غیرقابل قبولی می‌شود. مناسب‌ترین روش برای تخمین میزان توزیع نامناسب، استفاده از مقدار (C_v) یا ضریب تنوع توزیع است. این روش به منظور مطالعات صنعتی و آکادمیک بسیار مفید است. مقدار C_v به طور معمول برای آکنه‌های منظم توسط روش‌های تجربی به دست می‌آید. ضریب تنوع توزیع مایع از معادله زیر محاسبه می‌شود [۷]:

$$C_v = \sqrt{\frac{1}{A_t} \sum_{i=1}^N A_i i (\frac{u_i - \bar{u}}{\bar{u}})^2} \quad (7)$$

$$\bar{u} = \frac{1}{A_t} \sum_{i=1}^N A_i u_i \quad (8)$$

A_t : سطح مقطع کل برج

u_i : سرعت ظاهری در هر سلول

\bar{u} : سرعت متوسط

N : تعداد سلول‌ها

i : شماره سلول

A_i : مساحت هر سلول

یک C_v برابر صفر یک موقعیت جریان یکنواخت^۱ را نشان می‌دهد.

1. Mal Distribution
2. Plug

محدوده C_v بین ۰ تا ۱ در نظر گرفته شده است.

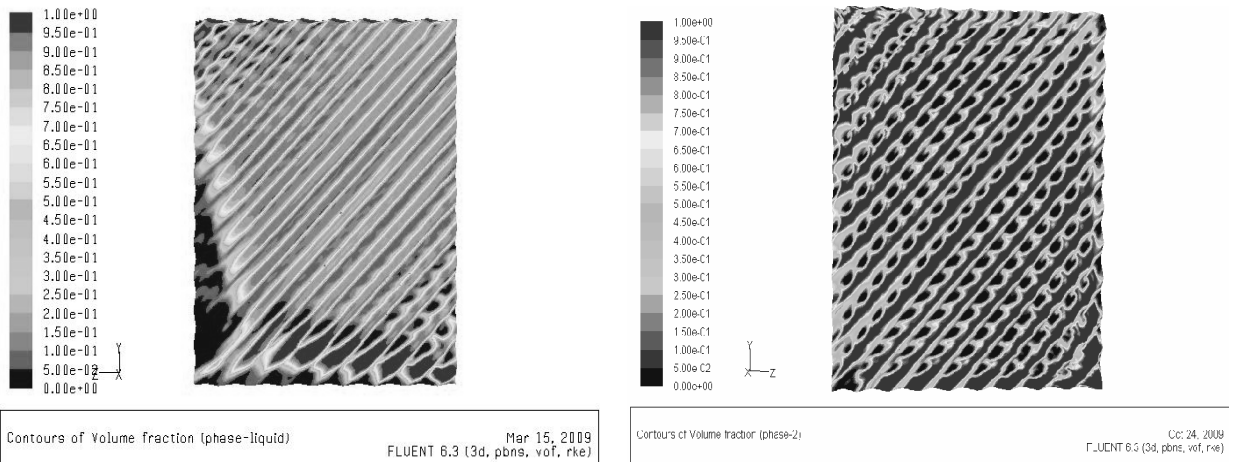
۵- نتایج و بحث

در این تحقیق، شبکه‌بندی با عناصر چهار وجهی و الگوریتم کوپر از نظر کیفیت و کمیت مورد بررسی قرار گرفتند. در شبکه‌بندی با الگوریتم کوپر، دیواره آکنه به عناصر کوچکتر تقسیم‌بندی گردید. با وجود این، تعداد عناصر در شبیه‌سازی آکنه با ضخامت فیلم مایع ۰/۲۱ mm برابر ۱۰۹۶۵۰۱ می‌باشد که نسبت به شبیه‌سازی آکنه با عناصر چهاروجهی به تعداد ۳۰۱۰۰۰۰ کاهش یافت که برای کاهش هزینه محاسباتی بسیار مؤثر می‌باشد. به علت به کار بردن عناصر مکعبی و قابلیت شبکه‌بندی با اندازه‌های متفاوت و استفاده از عناصر ریزتر در نواحی دیواره کیفیت شبکه‌بندی افزایش یافت. برای محاسبه دقیق جریان‌های آشفته، نیاز به برخی از ملاحظات در هنگام شبکه‌بندی داریم. از آنجا که آشفتگی نقش مهمی در انتقال تکانه متوسط و متغیرهای دیگر بازی می‌کند، اگر دقت بالا مورد نیاز باشد، باید اطمینان حاصل شود که کمیت‌های آشفته در جریان‌های پیچیده درهم به خوبی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. از اینرو در نتایج عددی جریان‌های آشفته، تمایل به وابستگی شبکه‌بندی بیشتر از جریان‌های آرام است. شبکه‌بندی نزدیک دیواره با نمایش دادن یا رسم کردن y^+ کنترل می‌شود. در این تحقیق با بررسی شبکه‌بندی در نرم افزار فلوننت میزان y^+ در محدوده $4/5 < y^+ < 7$ قرار گرفته است که اکثر مواقع در محدوده زیر لایه^۲ قرار گرفته و قابلیت بررسی هر سه جریان درهم، گذرا و آرام در آن فراهم است.

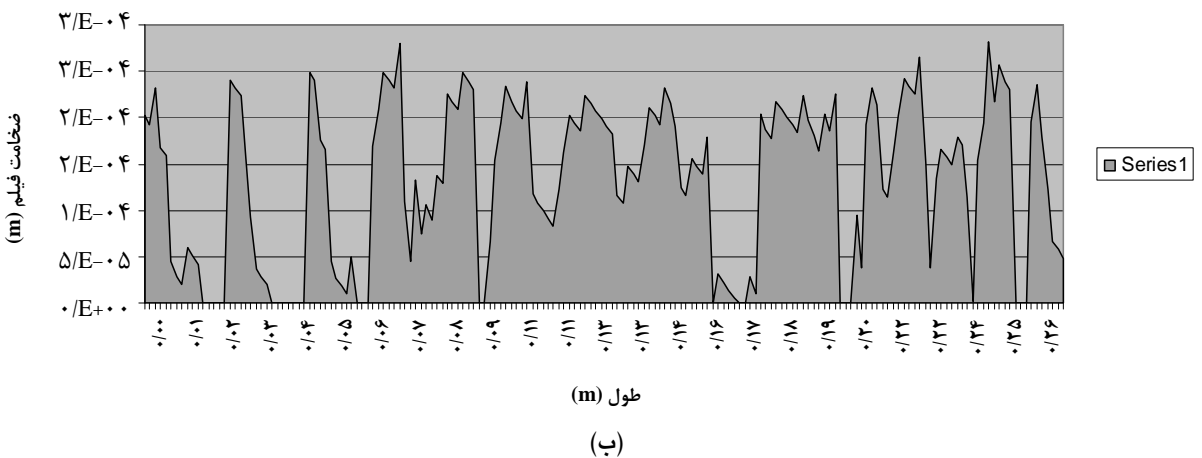
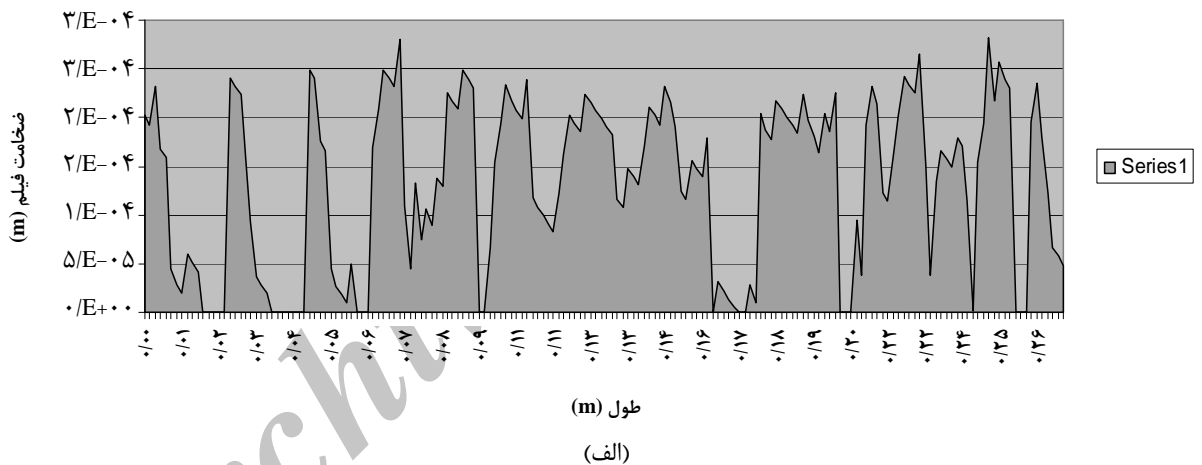
شکل (۶) نشان دهنده مقایسه نحوه توزیع فیلم مایع با عنصر چهاروجهی و الگوریتم کوپر در سرعت حقیقی ۰/۰۶۴ m/s فاز مایع با ضخامت ۰/۲۱ mm می‌باشد.

همانگونه که مشاهده می‌گردد در شبکه‌بندی با الگوریتم کوپر توزیع مایع بسیار یکنواختی نسبت به شبکه‌بندی چهار وجهی برقرار است. ضخامت فیلم مایع درون یک کانال در دو شبکه‌بندی در شبیه‌سازی با سرعت حقیقی ۰/۱۵۵۰ m/s فاز مایع مورد بررسی قرار گرفته و در شکل (۷) نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود نقاط خشک در شبیه‌سازی با شبکه‌بندی چهار وجهی وجود دارد و کانال به‌طور مطلوب آبرسانی نشده است.

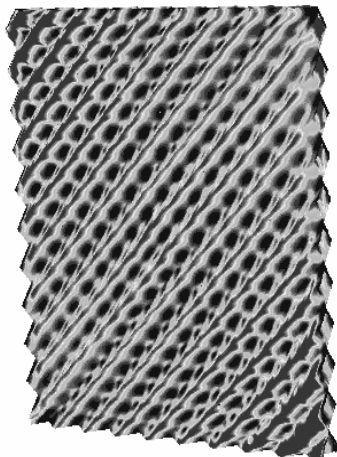
3. Sublayer



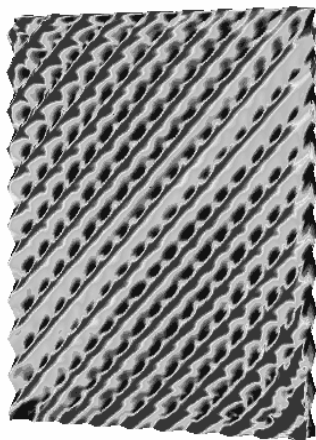
شکل ۶- نحوه توزیع فیلم مایع (الف) عنصر چهار وجهی (ب) الگوریتم کوپر



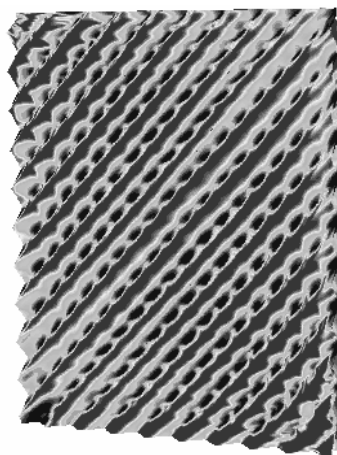
شکل ۷- مقایسه ضخامت فیلم مایع بر حسب طول کانال: (الف) عنصر چهار وجهی (ب) الگوریتم کوپر



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۸- کانتورهای کسر حجمی در سرعت‌های مختلف برای حالت بهینه

(الف) $u_{ie}=0.064$ m/s (ب) $u_{ie}=0.094$ m/s (ج) $u_{ie}=0.155$ m/s

با شبیه‌سازی در حالت الگوریتم کوپر در سه سرعت مختلف مایع، مشخص می‌گردد که با افزایش سرعت مایع، توزیع مناسب‌تری از مایع برقرار و اکثر سطح آکنه توسط مایع پوشانده می‌شود. نتایج در شکل (۸) بیانگر این مطلب می‌باشند.

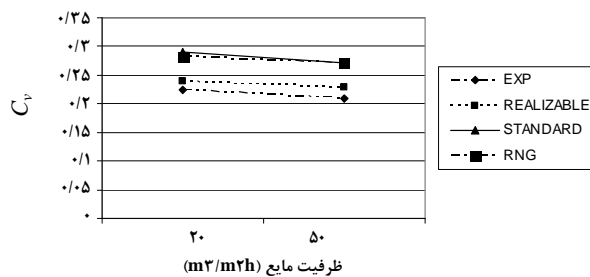
در این تحقیق سه مدل $(k - \epsilon)$ استاندارد و RNG $(k - \epsilon)$ و $Realizable (k - \epsilon)$ (قابل درک) مورد بررسی قرار گرفته و با توجه به محاسبه مقدار توزیع نامناسب (C_v) و تطابق آن با نتایج آزمایشگاهی [۷] Olujic، مدل $Realizable (k - \epsilon)$ (قابل درک) به‌عنوان حالت بهینه انتخاب شد. مقایسه نتایج حاصل از سه مدل در هم در شکل (۹) نشان داده شده است.

۶- نتیجه‌گیری

در این تحقیق، هیدرودینامیک آکنه منظم (مونترپک B1-250Y) در حالت پایا با استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی در نرم‌افزار فلوئنت با دیدگاه حجم سیال به صورت سه بعدی شبیه‌سازی شده است. تأثیر مدل‌های آشفتگی و شبکه‌بندی سیستم بر روی توزیع کسر حجمی فاز مایع مورد مطالعه قرار گرفت. با توجه به اینکه هدف بررسی چگونگی توزیع مایع در آکنه منظم (مونترپک B1-250Y) می‌باشد، از این رو، برای برقراری روند مناسب توزیع سیال باید شبکه‌بندی مناسبی تعبیه گردد که با بررسی‌های انجام شده الگوریتم کوپر به عنوان شبکه‌بندی بهینه انتخاب گردید. الگوریتم کوپر به علت استفاده از شبکه‌های با کیفیت مکعبی و گوه‌ای و استفاده از شبکه‌بندی ریزتر در نواحی دیواره، توزیع مایع بسیار مناسب‌تری را نسبت به شبکه چهار وجهی نشان داد. با توجه به اینکه مدل‌های آشفتگی بر متغیرهایی مانند سرعت تأثیر گذار است و محاسبه توزیع نامناسب وابسته به سرعت فاز مایع می‌باشد، مدل‌های مختلف آشفتگی مورد بررسی قرار گرفت. مدل $Realizable (k - \epsilon)$ کمترین خطا را نسبت به داده‌های آزمایشگاهی در بررسی توزیع نامناسب فاز مایع دارد و دو مدل $(k - \epsilon)$ استاندارد و RNG $(k - \epsilon)$ دارای پیش‌بینی‌های تقریباً مشابهی می‌باشند. این مطلب نشان‌دهنده آن است که مدل $Realizable (k - \epsilon)$ برای آکنه‌های منظم با هندسه پیچیده، قابلیت بررسی بهتر جریان آشفته را دارا است.

مراجع

- [1] Mahr, B. Mewes, D. "Two-Phase Flow in Structured Packings: Modeling and Calculation on a Macroscopic Scale", *AIChE Journal* pp- 813-821 (2008).
- [2] Toye, D. Crine, M. Marchot, P. "Imaging of Liquid Distribution in Reactive Distillation Packings with a New High-Energy X-Ray Tomography", *Measurement Science and Technology*, Vol 16, pp-2213-2220(2005).
- [3] Szulczewska, B. Gorak, a. "Liquid Flow on Structured Packing: CFD Simulation and Experimental Study" *Chem.Eng.Technol* (2003).
- [4] van baten, J.M. Krishna ,R. "Radial and Axial Dispersion of the Liquid Phase Within a KATAPAK-S Structure: Experiments Vs. CFD Simulations", *Chemical Engineering Science*, Vol 56, pp- 813-821 (2001).
- [5] Olujic, Z. graauw, j.de. "A Corrugation Geometry Based Model for Efficiency of Structured Distillation Packing", *Chemical Engineering and Processing*, Vol 38, pp-683-695 (1999).
- [6] fluent 6.3, user guide, fluent Inc.
- [7] Oljic, Z. Van baak, R. "Liquid distribution properties of conventional and high capacity structured packings ", *Trans IChemE Part A- Vol 84*, pp-874-876 (2006).
- [8] Corna ,P. Dente, M. "A Phenomenological Model for Fluid-Dynamics Evaluation of Structured Packing Systems" *Chemical Engineering Science* (2003).
- [9] Ataki, A. Bart, H.J. "The Use of the VOF-Model to Study the Wetting of Solid Surfaces", *Chem. Eng. Technol* (2004).
- [10] Roy, S. Kemoun ,A. "Countercurrent Flow Distribution in Structured Packing Via Computed Tomography", *Chemical Engineering and Processing*, pp-742-754 (2004).
- [11] Mohamed Ali, A. Olujic, Z. "Experimental Characterization and Computational Fluid Dynamics Simulation of Gas Distribution Performance of Liquid (Re) Distributors and Collectors in Packed Columns", *Trans IChemE* , vol 43, pp- 465-476 (2003).
- [12] Atta, A. Roy, Shantanu, "Krishna Investigation of liquid maldistribution in trickle-bed reactors using porous media concept in CFD", *Chemical Engineering Science* 62: 7033-7044(2007).
- [13] Fitz, C. King , W. Kunesh, D.W. H. G, "Controlled liquid maldistribution studies on structured packings", *Trans IChemE, Prat A, Chem Eng. Res. Des* 77: 482-486(1999).
- [14] Kenag, E.Y. Gorak Towards ,A. "improvement of reactive separation performance using computational fluided dynamic", *parocedings of the 3rd Eor.cong of chemical Engineering*, Nuremberg, june 2005.
- [15] Haghshenas Fard, M. Zivdar, M. Rahimi, M. R. Nasr Esfahani, M. Afacan, A. Nandakumar ,K. Chuang, K. □T. "CFD simulation of Gas distribution Performance of Gas Inlet systems in packed columns", *Chemical Engineering & Technology*, No9, PP- 30, (2007).



شکل ۹- تأثیر مدل‌های درهم بر مقدار C_p

علائم و واحدها

- A_i : مساحت سلول m^2
- A_r : مساحت کل سطح مقطع m^2
- a_p : مساحت سطح آکنه $\frac{m^2}{m^3}$
- b : طول قاعده چین خوردگی m
- C_p : ضریب تنوع توزیع مایع -
- g : شتاب جاذبه $\frac{m}{s^2}$
- h : ارتفاع چین خوردگی m
- s : طول ضلع چین خوردگی m
- N : تعداد سلول‌ها
- \bar{u} : سرعت متوسط محلی $\frac{m}{s}$
- u_{ge} : سرعت حقیقی گاز $\frac{m}{s}$
- u_{Le} : سرعت حقیقی مایع $\frac{m}{s}$
- u_{ls} : سرعت ظاهری مایع $\frac{m}{s}$

علائم یونانی

- α : زاویه چین خوردگی °
- δ : ضخامت فیلم مایع m
- ε : تخلخل -
- μ_L : گرانیوی مایع PaS
- ρ_L : چگالی مایع $\frac{kg}{m^3}$