

الله أكبر
الحمد لله
الذي هدانا لهذا
والذي كنا لنهتدي لولا
أن هدانا الله



دانشکده مهندسی شیمی

مدل سازی و شبیه سازی راکتور بستر سیال تولید

استایرن

سید روح اله بنی طباطبائی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته

مهندسی شیمی - ترموسینتیک

آبان ماه ۱۳۸۳

به نام خدا

دانشکده مهندسی شیمی

مدل سازی و شبیه سازی راکتور بستر سیال تولید استایرن

سید روح اله بنی طباطبائی

پایان نامه کارشناسی ارشد

در رشته

مهندسی شیمی - ترموسینتیک

استاد راهنما:

دکتر سید مهدی علوی

آبان ماه ۱۳۸۳

تقدیم به

مهربانی‌های مادرم

و

فداکاری‌های پدرم

و

محبت‌های همسرم

چکیده

در این پروژه، فرایند هیدروژن‌گیری از اتیل‌بنزن که مهمترین روش تولید استایرن است، شبیه‌سازی شده است. برای برنامه‌نویسی از نرم‌افزار Matlab استفاده شده است. در نهایت، نتایج پیش‌بینی شده توسط مدلها با نتایج تجربی مقایسه شده است.

در فصل اول، مقدمه‌ای در مورد استایرن و همچنین روشهای مدلسازی راکتورهای بسترسیال در رژیمهای مختلف سیالیت گفته شده است. پس از این مقدمه، خصوصیات استایرن، کاربردهای عمده استایرن و روشهای تولید این ماده در فصل بعد توضیح داده شده است. در فصل سوم، جدیدترین و کاربردی‌ترین روشهای مدلسازی و همچنین مدل‌های ارائه شده در سالهای اخیر مورد بررسی قرار گرفته و روابط مورد استفاده در هر مدل بیان شده است. پس از این فصل، در فصل چهارم مدل آقایان Thompson و Grace به عنوان مدل اصلی انتخاب شده و فرمولهای مورد استفاده در این مدل به طور کامل توضیح داده شده است. در آخر، نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی راکتور توسط مدل اخیر و همچنین مدل دینامیکی به صورت درصد تبدیل اتیل‌بنزن، انتخاب‌پذیری استایرن و بازده استایرن نشان داده شده است.

در فصل آخر، نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی مورد بحث قرار گرفته است و پیشنهاداتی نیز ارائه شده است.

نتایج بدست آمده از مدل دینامیکی نشان می‌دهند که تبدیلهای پیش‌بینی شده توسط این مدل معمولاً از مقادیر تجربی کمترند. همچنین نتایج بدست آمده از مدل Thompson و Grace نشان می‌دهند که این مدل قادر است پارامترهای مربوط به عملکرد راکتور را تا دمای 700°C به خوبی پیش‌بینی کند.

تقدیر و تشکر

با تقدیر و تشکر از استاد محترم دکتر علوی که مرا در تهیه این پروژه کمک و راهنمایی کرده‌اند. امید است که بیش از این از دانش و راهنمایی‌های ایشان برخوردار گردم.

فهرست مطالب

| | |
|----|---|
| ۱ | فصل اول:..... |
| ۳ | ۱-۱- مدلسازی بستر سیال حبابی |
| ۵ | ۲-۱- مدلسازی بستر سیال آشفته |
| ۵ | ۳-۱- مدل‌های مورد استفاده در بسترهای سیال گردشی |
| ۱۰ | فصل دوم:..... |
| ۱۱ | ۱-۲- تاریخچه |
| ۱۱ | ۲-۲- خواص استایرن |
| ۱۲ | ۳-۲- کاربردهای استایرن |
| ۱۲ | ۱-۳-۲- پلی استایرن |
| ۱۳ | ۲-۳-۲- لاستیک استایرن - بوتادین |
| ۱۳ | ۳-۳-۲- پلاستیک آکریلونیتریل - بوتادین - استایرن |
| ۱۳ | ۴-۳-۲- لاتکس استایرن - بوتادین |
| ۱۴ | ۵-۳-۲- پلاستیک استایرن - آکریلونیتریل |
| ۱۴ | ۶-۳-۲- رزین پلی استر غیر اشباع |
| ۱۴ | ۷-۳-۲- رزین استایرن - آلکید |
| ۱۴ | ۸-۳-۲- استایرن - فنل |
| ۱۵ | ۴-۲- روشهای تولید استایرن |
| ۱۵ | ۱-۴-۲- روش هیدروژن گیری از اتیل بنزن |
| ۱۵ | ۱-۱-۴-۲- شیمی واکنش |
| ۱۶ | ۲-۱-۴-۲- اجزاء کاتالیست |
| ۱۷ | ۳-۱-۴-۲- نقش بخار |
| ۱۸ | ۴-۱-۴-۲- نقش تسریع کننده ها |
| ۱۹ | ۵-۱-۴-۲- راکتورها |
| ۲۴ | ۲-۴-۲- روش هیدروژن گیری از اتیل بنزن و اکسیداسیون هیدروژن |
| ۲۵ | ۱-۲-۴-۲- ترکیب کاتالیست و پیکربندی راکتور |
| ۲۹ | ۲-۲-۴-۲- فرآیند SMART |
| ۳۱ | ۳-۴-۲- روش هیدروژن گیری اکسیدی از اتیل بنزن |
| ۳۲ | ۱-۳-۴-۲- اکسیداسیون کاتالیستی با اکسیدهای اسید |
| ۳۳ | ۲-۳-۴-۲- اکسیداسیون کاتالیستی با اکسیدهای redox |
| ۳۴ | ۱-۲-۳-۴-۲- اکسیداسیون کاتالیستی |
| ۳۴ | ۲-۲-۳-۴-۲- اکسیداسیون غیر کاتالیستی |

| | |
|----|---|
| ۳۵ | ۴-۴-۲- روش تولید استایرن از تولوئن |
| ۳۶ | ۴-۴-۱- فرآیند کاتالیستی |
| ۳۷ | ۴-۴-۲- فرآیند استوکیومتری |
| ۳۸ | ۴-۴-۵- روش هیدروژن گیری از اتیل بنزن در حضور CO_2 |
| ۳۹ | ۴-۴-۵-۱- استفاده از کاتالیست پایه آهن |
| ۳۹ | ۴-۴-۵-۱-۱- نتایج آزمایش |
| ۴۲ | ۴-۴-۵-۱-۲- اثر کاتالیستها |
| ۴۴ | ۴-۴-۵-۲- استفاده از کاتالیستهای مختلف |
| ۴۶ | ۴-۴-۵-۳- بررسی ترمودینامیکی |
| ۴۹ | ۴-۴-۶- تکنولوژی غشاء |
| ۵۰ | ۴-۴-۶-۱- پیکربندی روش |
| ۵۱ | ۴-۴-۶-۲- پیکربندی کاتالیست |
| ۵۳ | ۴-۴-۷- روش استفاده از بستر سیال |
| ۵۵ | فصل سوم: |
| ۵۶ | ۳-۱- مدل ساده دوفازی |
| ۵۷ | ۳-۲- مدل دو فازی دینامیکی (DTP) |
| ۵۸ | ۳-۳- مدل دوفازی در دماهای بالا |
| ۵۹ | ۳-۳-۱- بحث و نتیجه گیری |
| ۶۲ | ۳-۳-۲- مدل هیدرودینامیکی |
| ۶۳ | ۳-۴- شبیه سازی بستر سیال آشفته با استفاده از روش ترتیبی |
| ۶۳ | ۳-۴-۱- مقدمه |
| ۶۵ | ۳-۴-۲- توسعه مدل |
| ۶۶ | ۳-۴-۲-۱- منطقه پایینی TFBC |
| ۶۸ | ۳-۴-۲-۲- منطقه بالایی TFB |
| ۶۹ | ۳-۴-۳- روش شبیه سازی |
| ۷۰ | ۳-۵- مدل بستر سیال گردشی |
| ۷۲ | ۳-۵-۱- مدلسازی رژیم انتقال نیوماتیک |
| ۷۴ | ۳-۵-۲- مدلسازی رژیم سیالیت تند |
| ۷۹ | ۳-۶- مدل Grace و Thompson برای تغییر حجم |
| ۸۲ | ۳-۶-۱- اثر تغییر حجم بر روی متغیرهای هیدرودینامیکی |
| ۸۳ | ۳-۶-۱-۱- سرعت گاز |
| ۸۴ | ۳-۶-۱-۲- احتمالهای رژیم |
| ۸۷ | فصل چهارم: |

| | |
|-----|---|
| ۸۸ | ۱-۴ - مقدمه |
| ۹۰ | ۲-۴ - مدل دوفازی بستر حبایی |
| ۹۳ | ۳-۴ - مدل تک فازی راکتور پلاگ با توزیع محوری |
| ۹۳ | ۴-۴ - همگرایی مدل G2PB به مدل ADPFR |
| ۹۴ | ۵-۴ - متوسط گیری احتمالی پارامترهای مدل |
| ۹۶ | ۶-۴ - مدل عمومی GBT |
| ۹۸ | ۷-۴ - نتایج آزمایشگاهی |
| ۹۸ | ۱-۷-۴ - محاسبه پارامترهای سینتیکی برای کاتالیست صنعتی |
| ۱۰۰ | ۲-۷-۴ - محاسبه پارامترهای سینتیکی برای کاتالیستهای تهیه شده |
| ۱۰۰ | ۱-۲-۷-۴ - تهیه کاتالیست |
| ۱۰۱ | ۲-۲-۷-۴ - تجهیزات فرآیند و نتایج |
| ۱۰۵ | ۸-۴ - شبیه سازی فرایند |
| ۱۰۶ | ۱-۸-۴ - شبیه سازی با استفاده از مدل Grace و Thompson |
| ۱۰۸ | ۱-۱-۸-۴ - الگوریتم حل |
| ۱۰۸ | ۱-۱-۱-۸-۴ - الگوریتم حل در حالت دوبعدی |
| ۱۰۹ | ۲-۱-۱-۸-۴ - الگوریتم حل در حالت یک بعدی |
| ۱۱۰ | ۲-۸-۴ - نتایج حاصل از شبیه سازی |
| ۱۱۲ | فصل پنجم: |
| ۱۱۳ | ۱-۵ - نتیجه گیری |
| ۱۱۴ | ۲-۵ - پیشنهاد ها |
| ۱۱۵ | منابع و مراجع |

فهرست شکلها

- شکل ۱-۱- دو مدل برای توزیع محوری جامد ۶
- شکل ۲-۱- راکتور CFB در دبی‌های مختلف جامد و دبی ثابت گاز ۷
- شکل ۳-۱- تبدیل در راکتور CFB با هردو مدل ۸
- شکل ۱-۲- انرژی آزاد واکنش در حالت استاندارد بر حسب دما ۱۶
- شکل ۲-۲- شمای راکتور لوله ای ۱۹
- شکل ۳-۲- راکتور آدیاباتیک ۲۰
- شکل ۴-۲- ادغام دو نوع راکتور ۲۱
- شکل ۵-۲- راکتور ایزوترمال ۲۲
- شکل ۶-۲- راکتور آدیاباتیک ۲۳
- شکل ۷-۲- ترکیب راکتور آدیاباتیک و ایزوترمال ۲۳
- شکل ۸-۲- شمای فرآیند تزریق اکسیژن به همراه خوراک ۲۸
- شکل ۹-۲- شمای راکتور تزریق اکسیژن در جریان خروجی ۲۹
- شکل ۱۰-۲- شمای فرآیند SMART ۲۹
- شکل ۱۱-۲- راکتور مورد استفاده در روش SMART ۳۰
- شکل ۱۲-۲- شمای راکتورهای صنعتی فرآیند SMART ۳۱
- شکل ۱۳-۲- واکنشهای انجام شده در روش هیدروژن گیری اکسیدی ۳۲
- شکل ۱۴-۲- تبدیل اتیل بنزن بر حسب مقادیر اکسید و انادیوم ۳۴
- شکل ۱۵-۲- راکتور بستر سیال فرآیند استوکیومتری ۳۸
- شکل ۱۶-۲- مسیرهای مختلف واکنش ۳۹
- شکل ۱۷-۲- نمودار بازده تعادلی استایرن بر حسب دما ۴۰
- شکل ۱۸-۲- شمای کلی فرآیند جدید و قدیم با استفاده از CO_2 ۴۰
- شکل ۱۹-۲- فعالیت چند کاتالیست پایه آهن ۴۳
- شکل ۲۰-۲- اثر خوراک بر روی بازده و انتخاب پذیری در فرآیند CO_2 ۴۳
- شکل ۲۱-۲- بازده محصولات مایع در H_2 و $0.42 H_2$ ۴۶
- شکل ۲۳-۲- اثر نسبت CO_2 یا H_2O به اتیل بنزن روی بازده تعادلی استایرن ۴۸
- شکل ۲۴-۲- اثر مقدار CO_2 در خوراک بر روی بازده استایرن در تعادل ۴۸
- شکل ۲۵-۲- شمای راکتور غشایی کاتالیستی (CMR) و راکتور کاتالیستی غشاء بی اثر (IMCR) ۵۲
- شکل ۲۶-۲- شمای راکتور غشایی سرامیکی برای جداسازی هیدروژن ۵۳
- شکل ۱-۳- تغییرات غلظت‌های محلی ذره با سرعت ظاهری و دما ۶۰
- شکل ۲-۳- اثر دما بر روی غلظت ذره در فاز چگال و فاز رقیق در سرعت‌های مختلف گاز ۶۱
- شکل ۳-۳- شماتیک بستر سیال آشفته در مقیاس آزمایشگاهی ۶۵

- شکل ۳-۴- فلودیاگرام شبیه سازی ۷۰
- شکل ۳-۵- دیاگرام ساده شده یک بستر سیال گردشی ۷۱
- شکل ۳-۶- تبدیلهای تعادلی و پیشگویی شده SO_2 برای رایزر اولیه برحسب دمای ورودی ۷۸
- شکل ۳-۷- درصد مولی SO_2 برحسب طول رایزر ۷۹
- شکل ۳-۸- پروفایلهای محوری سرعت گاز برای ۴ حالت مختلف ۸۳
- شکل ۳-۹- پروفایلهای محوری احتمال سیالیت آشفته ۸۴
- شکل ۳-۱۰- (A) پروفایلهای محوری احتمال رژیم حالت ۴ و (B) دیاگرام احتمال رژیم براساس سرعت بدون بعد ۸۶
- شکل ۴-۱- شمای رآکتور بستر سیال مورد استفاده در مدل ۹۱
- شکل ۴-۱- درصد تبدیل اتیل بنزن با استفاده از مدل دینامیکی برای کاتالیست B ۱۰۶
- شکل ۴-۲- مقادیر تجربی و پیشبینی شده درصد تبدیل اتیل بنزن برای کاتالیست A ۱۱۰
- شکل ۴-۳- مقادیر تجربی و پیشبینی شده درصد تبدیل اتیل بنزن برای کاتالیست B ۱۱۰
- شکل ۴-۴- مقادیر تجربی و پیشبینی شده درصد تبدیل اتیل بنزن برای کاتالیست C ۱۱۱
- شکل ۴-۵- مقادیر تجربی و پیشبینی شده انتخابپذیری استایرن برای کاتالیست A ۱۱۱
- شکل ۴-۶- مقادیر تجربی و پیشبینی شده انتخابپذیری استایرن برای کاتالیست C ۱۱۱
- شکل ۴-۷- اثر سرعت ظاهری برروی درصد تبدیل اتیل بنزن ۱۱۲
- شکل ۴-۸- درصد تبدیل اتیل بنزن برای کاتالیستهای مختلف در شرایط صنعتی ۱۱۲
- شکل ۴-۹- درصد بازده استایرن برای کاتالیستهای مختلف در شرایط صنعتی ۱۱۳

فهرست جدولها

- جدول (۱-۲) - خواص فیزیکی استایرن ۱۱
- جدول (۲-۲) - موارد مصرف استایرن ۱۵
- جدول (۳-۲) - کاتالیستهای مختلف پایه اکسید ۳۳
- جدول (۴-۲) - پارامترهای اساسی تولید استایرن در دو روش و در حضور CO_2 ۴۱
- جدول (۷-۲) - انرژیهای تخمین زده شده مورد نیاز برای تولید استایرن ۴۲
- جدول (۸-۲) - مصرف انرژی در رآکتور و جداکننده ۴۲
- جدول (۷-۲) - خصوصیات کاتالیستهای مختلف پایه آهن ۴۵
- جدول (۸-۲) - بازده محصولات گازی روی کاتالیست شماره ۵ ۴۶
- جدول (۱۱-۲) - انرژیهای مورد نیاز برای تولید استایرن در حضور CO_2 و بخار ۴۹
- جدول (۱-۳) - معادلات حالت مدل ساده دوفازی ۵۶
- جدول (۲-۳) - روابط انتقال جرم و سیالیت ۵۷
- جدول (۳-۳) - معادلات حالت مدل دینامیکی دوفازی ۵۸
- جدول (۴-۳) - معادلات عمومی موازنه جرم و انتقال ۶۳
- جدول (۱-۴) - مشخصات راکتور بستر ثابت صنعتی و شرایط خوراک ۹۹
- جدول (۲-۴) - نتایج مدل هتروژن در مقایسه با دادههای صنعتی ۱۰۰
- جدول (۳-۴) - خصوصیات سه کاتالیست تهیه شده ۱۰۱
- جدول (۴-۴) - شرایط خوراک و نتایج تجربی کاتالیست A ۱۰۲
- جدول (۵-۴) - شرایط خوراک و نتایج تجربی کاتالیست B ۱۰۳
- جدول (۶-۴) - شرایط خوراک و نتایج تجربی کاتالیست C ۱۰۳
- جدول (۷-۴) - مقادیر پارامترهای سینتیکی برای کاتالیستهای مختلف ۱۰۵

فصل اول:

مقدمه

استایرن یکی از مواد مهم صنعتی می‌باشد که در صنعت استفاده زیادی دارد. از مهم‌ترین کاربردهای استایرن تولید پلی استایرن، لاستیک استایرن - بوتادین، ABS، SB و SAN می‌باشد [۱].

Denbigh در یکی از کتابهایش نوشته است: در علم همیشه لازم است که از پیچیدگی دنیای واقعی چکیده‌ای ساخت و به جای آن یک موقعیت با ایده آلی بیشتر یا کمتر جایگزین کرد که برای آنالیز مناسب تر باشد. این جمله مستقیماً برای مدلسازی جریان سیستمهای گاز- جامد مانند بسترهای آکنده، بسترهای سیال حبابی (BFB)^۱، بسترهای سیال آشفته (TFB)^۲ و بسترهای سیال گردشی (CFB)^۳ کاربرد دارد [۲].

راکتورهای بستر سیال در بسیاری از فرآیندهای شیمیایی شامل فرآیندهای گاز- جامد و فرآیندهای کاتالیستی کاربرد پیدا کرده است. نمونه های صنعتی چنین رآکتورهایی عبارتند از: کراکینگ کاتالیستی هیدروکربنها، گازسازی زغال و واکنشهای سنتز مانند سنتز فیشر- ترپس، تولید پلی اتیلن و انیدریدمالئیک.

مشکل پیش بینی عملکرد و تغییر مقیاس^۴ رآکتورهای بستر سیال برای یک تحقیق مستدل و یا بهبود یک فرآیند شیمیایی جدید، بسیار مهم هستند. عوامل عدم اطمینان موجود در تغییر مقیاس و مدلسازی بسترهای سیال، موانع اصلی در توسعه استفاده از بسترهای سیال در صنایع شیمیایی است. روشهای متعددی برای مدلسازی رآکتورهای بستر سیال در رژیمهای مختلف سیالیت وجود دارند. به عنوان نمونه می توان از مدل عمومی دو فازی و مدل K-L برای رژیم حبابی، مدل پلاگ و مدل دو فازی اصلاح شده برای رژیم آشفته و مدل هسته - حلقه برای رژیم تند نام برد. به هر حال، هیچکدام از این مدلها به طور کامل راضی کننده نیست. علاوه براین، هر رژیم به صورت مجزا بررسی شده و هر

¹ Bubbling Fluidized Bed

² Turbulent Fluidized Bed

³ Circulating Fluidized Bed

⁴ Scale up

مدل برای یک رژیم کاربرد دارد. بر خلاف روشهای مدلسازی مختلف، روشن است که رژیمهای مختلف سیالیت از قوانین جریانی مشابهی پیروی می کنند. اخیراً، Thompson و همکارانش یک مدل عمومی حبابی - آشفته پیشنهاد داده اند که یک انتقال ملایم را از جریان دو فازی حبابی به جریان تک فازی با توزیع محوری، پیش بینی می کند [۳].

تعداد زیادی از مدل‌های بستر سیال بر پایه مفهوم دو فازی سیالیت قرار دارند. در مدل ساده دو فازی، فرض می شود که تمام گاز اضافه‌ای را که برای مینیمم سیالیت مورد نیاز است از میان بستر به صورت حباب عبور می کنند. همچنین این مدل فرض می کند که فاز امولسیون در شرایط سیالیت مینیمم باقی می ماند. چون این مدل فرض می کند که حبابها عاری از جامد هستند، واکنش تنها در فاز امولسیون اتفاق می افتد [۳].

۱-۱- مدل‌سازی بستر سیال حبابی

بررسی های تاریخی انجام شده نشان می دهد که سه دسته مدل مختلف برای رژیم حبابی مورد استفاده قرار گرفته اند. در مطالعات اولیه بر روی سیستمهای گاز-جامد، جریان عبوری از بستر سیال حبابی را به صورت پلاگ در نظر می گرفتند. نتایج بدست آمده با کارهای تجربی مشابه تفاوت بسیار زیادی داشتند. نتایج مقایسه ها نشان می دهند که تماس خیلی ضعیف تر از مقدار موجود در راکتور پلاگ، در حد $1/10000$ آنچه انتظار داشته ایم، می باشد. این قضیه نشان می دهد که کنارگذر جدی سیال در راکتورهای بستر سیال حبابی وجود دارد و مدل پلاگ نباید مورد استفاده قرار گیرد.

چون مدل جریان پلاگ نتایج ضعیفی از جریان در بستر سیال حبابی را نشان دادند، Johnstone و Shen فکر کردند که شاید حبابهای بالارونده علت این اختلاف شدید باشند. بنابراین آنها یک مدل دو فازی را پیشنهاد دادند که از فازهای چگال و کم دانسیته تشکیل شده بود و فاز کم دانسیته نمایانگر حبابهای بالارونده بودند.

در حالت عمومی، این نوع از مدل ۶ پارامتر قابل تنظیم دارد. در موارد مختلف از ۱، ۲، ۳، ۴ و تا حتی از هر ۶ پارامتر آنها برای ارائه مدل استفاده شده است. اکنون تعدادی از این مدلها یکدیگر را نقض می کنند. به عنوان مثال، در یکی از آنها جریان گاز در فاز چگال به سمت پایین فرض می شود، در حالیکه در مدل دیگر جهت جریان گاز را به سمت بالا فرض می شود. بر خلاف این تناقضها، تمام این مدلها قادر بودند که با تنظیم مناسب پارامترها، داده های آزمایشگاهی را پیش بینی کنند. به هر حال، هیچ کدام از آنها در شرایط جدید و مختلف آزمایش نشده اند [۲].

پیش بینی آنها برای اندازه مختلف حبابها، در بستریهایی با هندسه متفاوت، در بستریهایی با مقادیر مختلف کاتالیست و مقادیر مختلف مواد خنثی و غیره چگونه است؟ هیچکدام از این تعداد زیاد مدل برای این شرایط تست نشده اند. بنابراین ما نمی دانیم کدام یک از آنها واقعیت را نشان می دهند. بنابراین، هیچکدام از آنها استفاده ای جز پوشاندن یا خلاصه کردن داده های گزارش شده یک مطالعه خاص را نداشتند. این قضیه به اندازه کافی خوب نبود و نیاز بود تا یک مدل پیش بین توسعه داده شود، به عبارت دیگر به یک مدل مهندسی نیاز داشتیم.

از مکانیک سیالات پایه، Harrison و Davidson رفتار گاز را در حبابهای بالارونده یک بستر سیال حبابی بررسی کردند. سپس Rowe و Partridge به طور تجربی نشان دادند که هر حباب بالارونده دنباله ای از جامد را به دنبال خود می کشد. این مطلب منجر به پیدایش دسته سوم تحقیقات شد و دهها مدل برای راکتور پیشنهاد شد که همه آنها از ترکیبات مختلف فرضیات ارائه شده استفاده می کردند. برای فهمیدن اینکه کدام مدل بهتر می تواند واقعیت را نشان دهد، باید دید که چگونه این مدلها مواردی را که در شرایط مختلف اتفاق می افتد، پیش بینی می کنند [۲].

۱-۲- مدلسازی بستر سیال آشفته

وقتی که سرعت گاز در یک بستر سیال حبابی افزایش پیدا می کند، حبابها شدیدتر می شوند و نوسانات فشار بیشتر می شود تا به نقطه ای می رسد که خصوصیت بستر تغییر می کند. حبابهای مجزا دیگر مشاهده نمی شوند، بستر یکنواخت تر و با تعداد زیادی بسته^۱ آشفته مشاهده می شود. علاوه بر این، نوسانات فشار به مقدار قابل توجهی کاهش پیدا می کنند. در این حالت بستر به صورت آشفته است، حمل جامد کم اهمیت تر شده و بحث سیکلون های داخلی بوجود می آید.

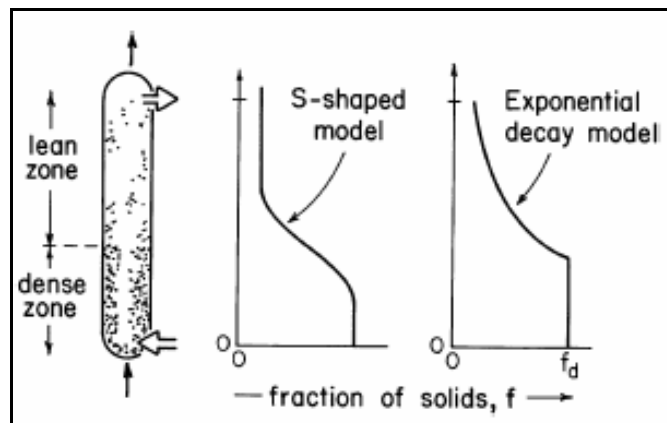
برای نشان دادن مدل های گازی در TFB از مدل های جریان پلاگ، جریان اختلاط کامل، تانک های سری و جریان پلاگ توزیع شده با یک پارامتر متغیر استفاده شده است. تمام این مدل ها رفتاری پیش بینی می کنند که مابین جریان پلاگ و جریان اختلاط کامل است. دسته دیگر مدلهایی که برای TFB مورد استفاده قرار می گیرد، مدل دو فازی است که یک فاز چگال و یک فاز رقیق دارد و گاز بین دو فاز تبادل می شود. این دسته مدل شبیه نوع استفاده شده در BFB است. این نوع مدل می تواند دسته بزرگی از موارد خاص را بوجود آورد. بیشتر این مدل ها باید قادر باشند که هر مجموعه ای از داده ها را نشان دهند.

۱-۳- مدل های مورد استفاده در بسترهای سیال گردشی

برای ذرات کاتالیست خیلی ریز و حتی سرعت های بالاتر جریان گاز، جامد بوسیله گاز از بستر خارج می شود و بستر باید دوباره پر شود. ما دو جایگزین داریم: جریان جامد به سمت پایین یا جریان جامد به سمت بالا. برای مشخص کردن عملکرد یک راکتور CFB، باید موارد زیر را معین کنیم:

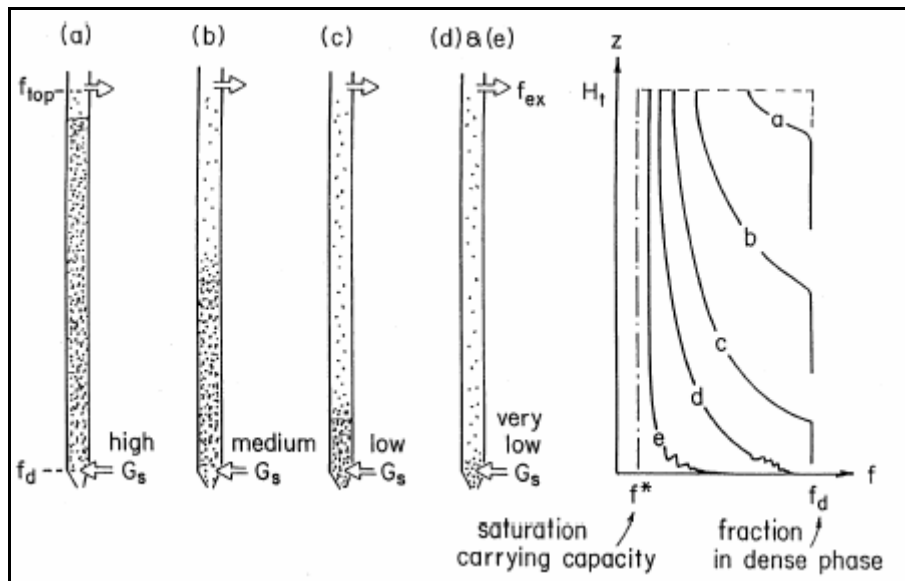
- I- توزیع محوری جامد در ظرف
- II- توزیع شعاعی جامد در هر سطحی از ظرف
- III- چگونگی تماس گاز و جامد در ظرف

راکتورهای CFB با جریان جامد به سمت بالا شبیه لوله های عمودی ساده هستند ولی طراحی آنها مشکل است. برای یک جریان جامد با دبی G_s و سرعت ظاهری گاز برابر U_0 ، جزء بالایی از جامد در قسمت پایین بستر و جزء کمی از جامد در قسمت بالایی بستر وجود دارد. شکل (۱-۱) دو مدلی را که برای نشان دادن این توزیع عمودی پیشنهاد شده اند، نشان می دهد. ریاضیات مدل S -- شکل دشوار است ولی مدل کاهش توانی ساده تر است. چون هر دو مدل به خوبی داده ها را پوشش می دهند، معمولاً مدل ساده تر مورد استفاده قرار می گیرد [۲].



شکل ۱-۱- دو مدل برای توزیع محوری جامد

- ۱- در دبی های مختلف جریان جامد و یک U_0 مشخص، توزیع عمودی جامد ها مطابق شکل (۱-۱) خواهد بود. با کمک ثابت کاهش توانی اندازه گیری شده، که گزارش شده و معلوم است، و یک موازنه جرم، ارتفاع ناحیه چگال پایینی و ناحیه بالایی مشخص خواهد شد.



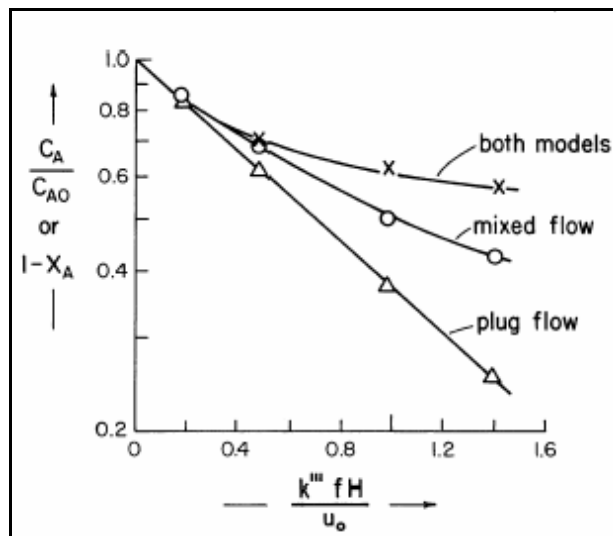
شکل ۱-۲- راکتور CFB در دبی‌های مختلف جامد و دبی ثابت گاز

ساده ترین مدلی که برای جریان در یک CFB وجود داشته، فرض می کند که جامد به صورت یکنواخت در بستر توزیع شده است. به عبارت دیگر، توزیع جامد را به صورت شعاعی در نظر می گیرند. به دلیل عدم استفاده زیاد، از این مدل صرف نظر می کنیم.

بسته ذرات، در حالیکه با یکدیگر برخورد کرده و از هم جدا می شوند، در ظرف بالا رفته و سقوط می کنند. همچنین ذرات تمایل دارند در دیواره های ظرف جمع شوند. مدلهایی که برای این حالت در نظر گرفته شده اند از یک هسته کم دانسیته تشکیل شده اند که در اطراف آن یک جریان چگال حلقوی وجود دارد. هر رژیم یک جزء ثابت جامد را تا انتهای ظرف داراست. در این مدلها فرض می شود که جامدهای هسته به سمت بالا جریان دارند، در حالیکه جامدهای حلقوی به آرامی به سمت بالا و یا به سمت پایین حرکت می کنند.

Shoenfelder و همکارانش دو منطقه مجزای شعاعی را فرض نکردند، بلکه فرض کردند که جزء جامد به طور پیوسته در طول شعاع ظرف تغییر کند. این اندازه گیریها بوسیله روش های تجربی انجام شد و مدل Shenfelder به محاسبات کامپیوتری نیاز دارد. اطلاعات تبدیل بدست آمده بوسیله

این افراد در راکتور CFB به طول ۱۴ متر و بوسیله دو مدلی که قبلا توضیح داده شد، آنالیز شده و نتایج در شکل (۳-۱) نشان داده شده اند. هر دو مدل نشان می دهند که به دلیل کنارگذر شدن جامدهای دیوار بوسیله جریان گاز، این راکتورها رفتار ضعیف تری را نسبت به راکتورهای پلاگ و اختلاط کامل دارند. بنابراین راکتور مفیدی نیستند. این قضیه، محققان را به سمت راکتورهای CFB با جریان به سمت پایین هدایت کرده است.



شکل ۳-۱- تبدیل در راکتور CFB با هر دو مدل

برای راکتورهای CFB با جریان به سمت پایین، داده های زیادی در مورد تماس گاز و جامد وجود ندارد. به هر حال، در مورد آنچه باید و آنچه نباید در مدل مربوط به این نوع راکتور فرض کرد موارد بیشتری وجود دارد. در برخی موارد، جامد سریعتر از گاز پایین می آید و در برخی موارد دیگر، گاز با سرعت بیشتری پایین می آید. غالبا برای ساده سازی فرض می شود که گاز و جامد با سرعت برابر پایین می آیند و همچنین فرض می شود که جامد به صورت یکنواخت در سطح مقطع راکتور پخش می شود. با چنین فرضیاتی، رفتار این راکتورها برای مدل سازی آسان تر خواهد بود. به هر حال، هنوز برای مناطق ورودی و خروجی جریان مشکلات حل نشده ای وجود دارد. در کل، راکتورهای با جریان به سمت پایین باید مفیدتر از راکتورهای با جریان به سمت بالا باشند.