**مدل سازی CFD اختلاط در یک میکروکانال بستر سیال**

یگانه داودبیگی\*1،ندا عظیمی2، آرمین ثابت قدم اصفهانی3و4، پرنیا ترابی 5

1 استادیار گروه مهندسی شیمی ، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس، ایران

2استادیار گروه مهندسی شیمی، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

3 دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

4 کارشناس پالایشگاه نفت ستاره خلیج فارس، بندرعباس، ایران

5 کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

[y.davoodbeygi@hormozgan.ac.ir](mailto:y.davoodbeygi@hormozgan.ac.ir) \*

**چکيده**

هدف از این مطالعه، بررسی استفاده از مدل سازی CFD در شبیه‌سازی اختلاط در یک میکروکانال بستر سیال است. در میکروکانال بسترسیال، به منظور اختلاط بیشتر، توزیع کننده­هایی در مسیر ورودی مواد به میکروکانال قرار گرفت. مدل سازی CFD هیدرودینامیک و اختلاط انجام شد و از مدل اولرین برای مدل سازی دو فاز مایع و جامد (بستر­سیال) استفاده شد. پروفایل­های غلظت و بردارهای سرعت به خوبی هیدرولیک جریان را نشان داد. در ادامه اثر سرعت جریان ورودی بر فرآیند اختلاط اتانول و اتانول رنگی در میکروکانال بستر­سیال بررسی گردید. همچنین اثر سرعت جریان های ورودی روی پراکندگی بسترسیال بررسی شد. نتایج نشان داد که با افزایش سرعت جریان ورودی، مقدار پراکندگی میکروذرات افزایش پیدا می یابد. نتایج حاصل از مدل سازی CFD با نتایج آزمایشگاهی موجود در یک مقاله معتبر مقایسه گردید و تطابق خوبی با داده های آزمایشگاهی مشاهده گردید.

**واژگان كليدي:**

**مدل سازی** CFD**، میکروکانال، اختلاط، بستر سیال.**

1. **مقدمه**

**اختلاط سیالات از فرآیندهای مهم در صنایع شیمیایی می‌باشد. هم زدن سیالات یک فرآیند و تقابل پیچیده در جریان توده سیال می‌باشد که سبب ایجاد نفوذ مولکولی و آشفتگی می‌‎شود و دلالت بر به وجود آمدن یک الگوی جریان چرخشی یا سایر الگوها در داخل مخزن به وسیله ابزار مکانیکی دارد. عمل اختلاط می‌تواند توسط همزن‌های مکانیکی و یا جت‌های سیال صورت گیرد [1 و 2]. با توجه به مقیاسی که در آن مخلوط شدن رخ می دهد، اختلاط را می توان به سه دسته تقسیم کرد: میکرو، مزو و ماکرو [3]. اختلاط ماکرو در مقیاس ماکروسکوپی صورت می گیرد به این معنی که متناظر با اختلاط در مقیاس راکتور و جریان های فرآیندی در مقیاس بزرگ بوده و توزیع زمان اقامت و یا غلظت میانگین مبین آن می باشد. در نتیجه اختلاط ماکرو سطح تماس دو سیال افزایش و طول مسیر اختلاط کاهش پیدا می کند. اختلاط مزو در مقیاسی بین اختلاط ماکرو و اختلاط میکرو است که می تواند ترکیبی از اختلاط ماکرو و اختلاط میکرو باشد [4]. اختلاط میکرو در اندازه کوچکترین مقیاس حرکت سیال و حرکت مولکولی است. مکانیزم اختلاط جهت انتقال جرم، حرارت و همچنین واکنش شیمیایی در سطحی که این پدیده ها رخ می دهند اختلاط به روش میکرو است. اختلاط میکرو بر انتخاب پذیری، بازده و کیفیت محصول نهایی در فرآیندهای مختلف صنعتی مانند خودکاتالیستی و فرآیندهای شیمیایی دیگر موثر است [5]. اطلاع از تاثیر اختلاط بر رفتار یک فرآیند شیمیایی در کنترل بهینه سازی توزیع محصولات و بهبود بازده آن ها، کاهش تشکیل محصولات جانبی نامطلوب و آسان نمودن خالص سازی محصول اهمیت ویژه ای دارد [6].**

**میکروکانال ها یک جایگزین مناسب برای سیستم های متداول انتقال جرم و حرارت هستند که به دلیل مسیر نفوذ کوتاه و نسبت سطح به حجم بالا باعث افزایش انتقال جرم و انتقال حرارت در زمان های ماند پایین می شوند ] 7[. علاوه بر این، افزایش مقیاس میکروکانال ها آسان بوده که با موازی قرار دادن آن ها فراهم می شود ]8[. در استفاده از میکروکانال ها به معایبی همچون افت فشار بالا، عدم قابلیت انتقال خوراک شامل ذرات جامد و امکان انسداد کانال می توان اشاره کرد؛ با این حال، استفاده از میکروکانال ها در عملیات های دو فازی بسیار مؤثر و کارآمد است. میکروراکتور، به عنوان یک ابزار جدید برای تشدید فرایند هاست که مزایای زیادی مانند حجم کوچک، نسبت سطح به حجم بزرگ، فاصله نفوذ کوتاه، توزیع زمان اقامت کم دارد و توانایی بالایی برای انتقال جرم و انتقال گرما دارد و موجب بهبود کنترل فرایند، افزایش ایمنی، پتانسیل بزرگ در فرایندهای جذب گاز، اکسیداسیون فاز مایع، هیدروژناسیون، استخراج مایع -مایع، سنتز نانوذرات می شود. تشدید فرایندهای شیمیایی با هدف استفاده موثر از مواد خام و انرژی، دلیل اصلی کوچک‌سازی راکتورهای شیمیایی است. به این معنی که با میکروراکتور، تعداد زیادی از دستگاه‌های اختلاط دو فازی، کوچک‌تر و کارآمدتر می‌شود. بنابراین بررسی پدیده‌های انتقال در میکروراکتورها ضروری است ]11-9[.**

**و همکاران (2007) [12] بسترهای میکروفلوئیدی و اثرات دیواره و کنش­پذیری را مورد مطالعه قرار دادند. اثر دیواره­ی خاص با افت فشار در هر واحد حجم بستر ذره تعیین شد و افزایش افت فشار پیش­بینی شده از معادله­ی برای توضیح کمی تاثیر اصطکاک دیوار بستر پیشنهاد شد.**

Gue **و همکاران(2009) [13] مشخصه های سیالی شدن در بسترهای میکروفلوئیدی با قطرهای داخلی مختلف را بررسی کردند. اثرات قطر بستر(**Dt**)، ارتفاع بستر استاتیک (**Hs**)، ذرات و خواص گاز بر افت فشار و مینیمم سرعت سیالی شدن (**Umf**) آزمایش شد و نتایج نشان داد که افت فشار تئوریک بسترهای میکروفلوئیدی از مقادیر آزمایشی ذرات مختلف و خواص گاز منحرف شده ‌است و یک دلیل ممکن آن ناشی از افزایش تخلخل بستر طبق قطرهای کوچکتر بستر است.**

Bertsch **و همکاران در سال ۲۰۰۱ [14]، دو نمونه میکرو میکسر طراحی کردند. آن ها این دو نمونه میکرومیکسر را بر اساس نمونه هایی در مقیاس معمولی طراحی کردند. نتایج حاصل از شبیه سازی** CFD **نشان داد که میکرو میکسر نوع اول کارایی بهتری نسبت به نوع دوم دارد. همچنین آن ها دریافتند که کانال با ساختار داخلی مارپیچی دلیل افزایش کارایی می باشد.**

Mouheb **و همکاران در سال 2012 [15]، با استفاده از** CFD **و همچنین بکارگیری روش میکروسکوپی اسکن کننده لیزری، انتقال جرم در داخل دو نوع میکرومیکسر** T **شکل و متقاطع را بررسی کردند. با عبور ماده فلوئورسنت از یکی از ورودی های کانال و با استفاده از میکروسکوپ می توان اختلاط را در هر دو میکرو کانال مشاهده و بررسی کرد. پروفایل های غلظت در رژیم های مختلف جریان مورد آزمایش قرار داده شدند تا این دو نوع میکرو کانال را با هم مقایسه کنند. نتایج نشان داد که میکرومیکسرهای متقاطع شدت اختلاط را تشدید می کنند و این موضوع در دبی های کمتری نسبت به کانال های** T **شکل اتفاق می افتد. بهبود اختلاط در میکرو کانال متقاطع به دلیل وجود گردابه های قویتر ایجاد شده و تنش برشی بالاتر است که طول انتقال مایع را کاهش می دهد. حضور یک خروجی در میکرو کانال** T **شکل، درجه آزادی کوچکتری را ایجاد می کند و همچنین افت فشار بالاتر در کانال** T **شکل به دست آمده است.**

Solehati **و همکاران (2014) [16] طرح میکرو کانال با ساختار موجی را ارائه کرده اند. میکروکانال با ساختار موجی به علت حضور جریان ثانویه متناوب که منجر به رژیم جریان آشوبناک شده است، شاخص اختلاط بالاتری نسبت به کانال مستقیم داشته است. ساختار موجی در اعداد رینولدز بالاتر با تشدید جابه جایی آشوبناک، مؤثرتر بوده است. در مواردی که عملکرد اختلاط، فرآیند و هزینه تولید دارای اهمیت است، به عنوان مثال در صنایع دارویی و فرآیندهای شیمیایی، این میکروکانال انتخاب مناسبی می تواند باشد. به دلیل حضور جریان ثانویه متناوب و در نتیجه آن رژیم جریان نامنظم عمل اختلاط در این میکرو کانال نسبت به کانال مستقیم بهتر انجام شده است.**

Kanaris **و همکاران (2015) [17] طرح های شش میکروکانال شامل** T **میکرومیکسر، هندسه مارپیچ متعامد ساده،** C **میکرومیکسر،** L **میکرومیکسر، هندسه مارپیچ انحنادار روی یک صفحه و هندسه مارپیچ انحنادار روی دو صفحه موازی را به طور عددی بررسی کرده اند. نتایج به کمک کد تجاری دینامیک سیالات محاسباتی** Ansys CFX **به دست آمده، و به صورت افت فشار و شاخص اختلاط ارائه شده اند. آن ها مشاهده کردند که میکرومیکسر** L **شکل با تفاوت کمی نسبت به میکرومیکسر** C **شکل و هندسه مارپیچ انحنادار روی دو صفحه موازی عملکرد اختلاط بهتری داشته است..**

هدف از این مطالعه، بررسی استفاده از مدل سازی CFD در شبیه‌سازی اختلاط در یک میکروکانال بستر سیال است. برای این منظور، اختلاط اتانول و اتانول رنگی درون یک میکروکانال بستر سیال بررسی می شود و نتایج آن با یک کار آزمایشگاهی مقایسه می شود. مدل اولرین[[1]](#footnote-1) برای مدل سازی دو فاز مایع و جامد (بستر­سیال) استفاده می­شود.

1. **شبیه‌سازی**

**2-1. تشریح فرایند اختلاط در میکروکانال بسترسیال([[2]](#footnote-2)μFB) مورد مطالعه**

مطالعه­ی گزارش­شده در اینجا یک تحقیق آزمایشی راجع­به عملکرد اختلاط FB است و آزمایشاتی روی بستر کره‌هایی با اندازه­ی میکرون شیشه­ای (­با قطر تقریباً 30، 35 و 40 m­) فلوئیدی شده با جریان اتانول در کانال شکل پلی ­دی­متیل­سیلوگزین 175 × 400 (PDMS) انجام شد. اختلاط با استفاده از تکنیک تصویربرداری از منظره­ی بالا معیار در راستای طول میکروکانال سیلان‌های نمونه شفاف رنگی موقع مخلوط شدن در کانال تعیین شد. عملکرد اختلاط به این است که FB قابلیت توزیع در مقایسه با سیستم یکسان بدون ذرات سنجیده شده‌است. عامل اثربخشی اختلاط و کارایی انرژی زایی اختلاط هر دو برای مطالعه ی کارایی اختلاط و مبادله ی بین آن و ورودی انرژی لازم استفاده شدند. این مطالعه در ابتدا برای ارزیابی عملکرد اختلاط FB ترتیب داده شد که مقطع آن به اندازه ی زیر میلی­متر بود و به عنوان تابع سرعت جریان متفاوت و تهییگی بستر مناسب و نسبت اندازه ی ذره به کانال در نظر گرفته شد [18].

**2-2. توضیح کار آزمایشگاهی**

ذرات بستر، میکرو­کره‌ای شیشه­ای با چگالی /kg 2500 هستند. ذرات با 3 اندازه­ی توزیعی باریک در نظر گرفته­شدند که عبارتند از میانگین قطرهای m 5/39 و 5/34 و 5/29 = dp با انحراف معیار m 5/1. اتانول برای فلوئیدی کردن ذرات استفاده شد. مقیاس بسترهای میکروفلوئیدی به معنای قابل مقایسه بودن نیروهای سطح با نیروهای هیدرو­دینامیک است که باعث انباشتگی ذره و چسبیدگی دیوار بستر به بافت بالقوه حتی در نقطه­ی جلوگیری از فلوئیدی­شدن می‌شود. برای توضیح اختلاط در FB، اتانول با رنگ آبی تجاری رنگی شده و به درون یکی از ورودی های میکروکانال Y شکل تزریق شد. در حالی­که اتانول غیر رنگی از طریق ورودی دیگر و به مقدار یکسان تزریق شد (یعنی سرعت جریان کامل به صورت مساوی بین دو تا کانال تقسیم شد).

**2-3- مشخصات فلوئیدی شدن بستر**

فضای خالی[[3]](#footnote-3) بستر محاسبه شد با :

|  |  |
| --- | --- |
| (1) |  |

به طوریکه مینیمم فضای خالی فلوئیدی شدن، و h ارتفاع بستر عملیاتی اولیه (ایستا) و حالت ثابت می باشند، ارتفاع بستر ایستا تحت جریان ورودی صفر در شروع هر آزمایش اندازه‌گیری شد. یک سری 100 تایی اندازه‌گیری ارتفاع حالت ثابت از توده‌های تصویر در هر سرعت جریان معلوم ثبت شد و مقدار h نهایی به صورت میانگین این­ها به دست آمد. مقادیر با درون­یابی کار قبلی این نویسندگان برآورد شد. رفتار انبساط FB به خوبی با همبستگی ریچاردسون – زاکی توصیف شد [19]:

|  |  |
| --- | --- |
| (2) |  |

به طوریکه u و سرعت سطحی و سرعت ته­نشینی ذره و به ترتیب ، k = پارامتر تجربی و n توان ریچارد سون – زاکی می­باشد.

**2-3- عملکرد اختلاط**

پایه­ی­ ارزیابی و سنجش عملکرد اختلاط، یک­دستی توزیع رنگ در نواحی مستطیلی مورد نظر در صفحه ی آزاد FB یا میکروکانال موقع کار تحت شرایط حالت ثابت بود و با تحلیل فیلم‌های دیجیتال گرفته شده با دوربین CCD تعیین شد. هر یک از تصاویر این توده با استفاده از نرم افزار Image J تجزیه و تحلیل شدند. سپس تصاویر کانال (R) قرمز تجزیه و تحلیل آماری شدند تا اثر بخشی اختلاط از لحاظ شاخص اختلاط نسبی تعیین شود.

|  |  |
| --- | --- |
| (3) | *=* |

به طوریکه انحراف معیار مقادیر شدت پیکسل درون RoI باشد و زیرنویس های "o" و " " به حالات غیر مخلوط اولیه و کاملاً مخلوط نهایی سیلان‌های فلوئید اشاره کنند. شاخص اختلاط نسبی به عنوان پایه­ای برای ارزیابی دو اندازه­ی متفاوت عملکرد اختلاط استفاده شد که ورودی انرژی را تشکیل می‌دهد. اولین مورد این اندازه‌ها عامل اثربخشی اختلاط Kockmann و همکاران[20] است که به‌دست آمد با:

|  |  |
| --- | --- |
| (4) | = |

به طوریکه چگالی سیال، طول اختلاط، افت فشار از عرض طول کانال/بستر باشد. طول اختلاط با رسم‌های شاخص اختلاط نسبی به صورت تابع فاصله از ورودی کانال به­وسیله ی برون­یابی خطی برای کانال خالی و تناسب توانی برای بستر­فلوئیدی تعیین شد. اندازه­ی دوم برای سنجیدن عملکرد اختلاط بازدهی انرژی­زا از اختلاط Falk و Commenge [21] بود که با نسبت میزان برشی (سرعت برشی) به دنبال کار Ottino و همکار آن [22] به دست آمد.

|  |  |
| --- | --- |
| (5) |  |

به طوریکه سرعت برشی باشد که به صورت مؤثر برای اختلاط استفاده شد و سرعت برشی کامل باشد مورد آخر را ارزیابی کردیم با استفاده از:

|  |  |
| --- | --- |
| *(6)* |  |

به طوریکه ویسکوزیته سیال و میزان اتلاف انرژی ویژه باشد، میزان اتلاف انرژی ویژه به‌دست آمد با:

|  |  |
| --- | --- |
| *(7)* |  |

به طوریکه Q سرعت جریان حجمی ، V حجم میکسر باشد، سرعت برشی مؤثر با متناسب ساختن زمان اختلاط با عبارت نظری Baldyga و Bourne به­دست آمده و اختلاط با بخش در جریان برشی به‌دست آمد به­وسیله­ی:

|  |  |
| --- | --- |
| (8) |  |

به طوریکه ضخامت شیارچه‌ها باشد که نصف پهنا کانال در این مورد است و D ضریب پخش باشد، زمان اختلاط با استفاده از رابطه (9) به­دست آمد:

|  |  |
| --- | --- |
| *(9)* |  |

**2-4- طراحی هندسه میکروکانال‌**

همان­طور که گفته شد، در این تحقیق، مدل سازی CFD فرایند اختلاط در یک میکروکانال بستر سیال انجام گرفته است. به منظور تصدیق نتایج مدل­سازی، هندسه مورد مطالعه از کار آزمایشگاهی Zivkovic و همکاران ]18[ انتخاب گردیده است.

**2-4-1- تعریف سیستم مورد مدل سازی**

میکروکانال‌ مورد مطالعه، شامل دو ورودی برای وارد کردن اتانول و اتانول رنگی می‌باشد. ستاپ آزمایشی در شکل 1 دیده می‌شود. μFB که به صورت تصویر و نمودار در تصویر نشان داده شده‌است.



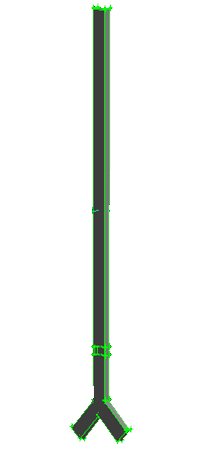
شکل 1. عکس واقعی میکروکانال‌های مورد مطالعه.

**جدول 1. ابعاد میکروکانال­**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| اسم کانال | قطر هیدرولیک  (μm) | سطح مقطح  (μm) |  | ط.ل کانال اختلاط  (mm) |
| Y-channel | 47/234 | 5/15 | 400×175 | 10 |
| Distributer | 7/103 |  | 200×70 |  |

2-4-2- ایجاد شکل هندسی

**اولین مرحله در انجام شبیه­سازی، ساخت هندسه سیستم و شبکه­بندی آن است. برای ایجاد کانال** Y **شکل، ابتدا یک کانال مستطیلی با سطح مقطع**mm **175/0 ×4/0 و طول** mm **10 رسم می شود. در مرحله بعد دو کانال کوچکتر با ابعاد 7/0×2/0 و طول 1 میلی متر رسم کرده و با زاویه 45 درجه و متقارن در انتهای کانال قبلی قرار گرفته می شود و سپس هر سه قسمت به یک حجم واحد تبدیل می شود. در آخر بارسم 5 مستطیل هم­اندازه و با فاصله‌های مساوی به­طوری ­که به دیواره­ی میکروکانال متصل نباشد، در نزدیکی ورودی رسم می‌ شود. این­کار برای ایجاد فشار بیشتر مواد ورودی و درنتیجه اختلاط بهتر با میکرو­ذرات شیشه­ای انجام می‌شود.**

****

شکل 2. میکروکانال Yشکل طراحی شده.

2-4-3- تعیین شرایط مرزی

**شرایط مرزی تعریف شده برای این مسئله عبارت است از شرط مرزی سرعت ورودی برای دو صفحه ورودی جریان، شرط جریان خروجی برای جریان خروجی از میکرومیکسر.**

**2-5- محاسبات در نرم افزار فلوئنت**

پس از ساخت هندسه سه بعدی سیستم در نرم­افزار *گمبیت*، هندسه مذکور توسط نرم­افزار *فلوئنت* فراخوانی می‌شود. محاسبات در این نرم افزار در یک مرحله زیر انجام شده‌است.

**2-5-1- حالت هیدرودینامیکی**

از آنجا که اين مسئله به همراه انتقال­جرم است، در بخش شرط مرزی ورودی میکروکانال‌، با توجه مقادير غلظت اجزاء، کسر جرمی آن‌ها در جريان نيز وارد گرديد. در بخش شرايط عملياتی، شتاب گرانش در جهت محور y برابر با m/s2 8/9- و محل مرجع فشاری در نقطه خروجی میکروکانال‌تعيين شد .*در این تحقیق، این حالات برای سرعت‌های مختلفی از فاز آبی و آلی بررسی خواهند­ شد. در بخش مواد تعریف شده و ویژگی‌های فیزیکی مربوط به آن‌ها مانند جرم ملکولی، ویسکوزیته و دانسیته معرفی شده‌است.*

ترکيبات مورد استفاده در انجام مدل سازی انتقال جرم شامل اتانول، اتانول رنگی و میکرو­ذرات شیشه ای در بخش مواد تعريف شده و ويژگی‌های فيزيکی مربوط به هر يک از مواد مانند جرم مولکولی، دانسيته ، ويسکوزيته و...معرفی گرديده­ است. در بخش مدل اجزاء[[4]](#footnote-4) گزينه انتقال اجزاء انتخاب شده است. برای محاسبه خواص مخلوط از جمله دانسيته، گرمای ويژه، هدايت حرارتی و ويسکوزيته از قواعد اختلاط[[5]](#footnote-5) استفاده گرديده است. برای ضريب نفوذ جرمی از گزينه تخمين رقيق[[6]](#footnote-6) استفاده شده و ضريب نفوذ همه ترکيبات به نرم­افزار معرفی گردیده است. مدل­سازی سه بعدی CFD شامل حل ناپايدار معادلات بقای ناوير-استوکس بوده که برای هر کميت φ به صورت زير بيان می‌شود]23 و 24: [

|  |  |
| --- | --- |
| *(10)* |  |

کميت φ با متغيرهایو Xi به ترتيب برای بقای اندازه حرکت و کسر جرمی است.

در مورد مسائلی که با انتقال جرم همراه است کسر جرمی ‌موضعی هر جزء (*Xi*) را با حل معادله نفوذ-جابجایی برای اجزاء می توان پیش­بینی کرد. اين معادله برای جزء i به صورت زیر می‌باشد ]23 [:

|  |  |
| --- | --- |
| *(11)* |  |

در نرم­افزار فلوئنت، معادله‌ای به اين شکل برای 1- Nجزء حل می‌شود که N تعداد اجزاء شيميايي موجود در سيستم می‌باشد. از آنجا که مجموع کسر جرمی اجزاء برابر يک می‌باشد، کسر جرمی N اُمين جزء از تفاضل يک با مجموع کسرهای جرمی 1-N جزء ديگر محاسبه می‌شود. شار نفوذی جزء i می‌باشد که ناشی از گراديان غلظت است. در جريان‌های آرام[[7]](#footnote-7)، فلوئنت بصورت پيش فرض از تخمين رقيق استفاده می‌کند که به اين ترتيب شار نفوذی به اين صورت نوشته می‌شود ]23 [:

|  |  |
| --- | --- |
| *(12)* |  |

که *Di,m* ضريب نفوذ جزء *i* در مخلوط می‌باشد.

**2-5-2- استراتژی حل**

از آنجایی که رژیم جریان در میکرومکانال‌ها آرام است بنابراین محاسبات بر مبنای رژیم جریان آرام انجام شد. از الگوريتم SIMPLE برای ارتباط فشار-سرعت استفاده شده و به منظور گسسته سازی فشار از روش PRESTO برای مومنتوم و کسر حجمی از روش روبه بالای مرتبه دوم استفاده شده‌است. محاسبات بصورت ناپايدار با بازه زمانی 7-10 تا 5-10 و با استفاده از فرمول ضمنی مرتبه دوم انجام گرفته و معيار همگرايي برای پارامترهای قابل پيش بينی 6-10 در نظر گرفته شده‌است.

**3-6- شبیه­سازی عددی**

**3-6-1- توضیح مدل Eulerian**

از آنجایی که میکروکانال شامل میکروذرات ( فاز جامد) و فاز مایع بوده ‌است، بنابراین روش چند فازی اولرین[[8]](#footnote-8) بر مبنای تئوری سنتیک جریان گرانولی[[9]](#footnote-9) برای مدل سازی این سیستم دوفازی به کار گرفته شده‌است. مدل سازی سه بعدی CFD شامل حل ناپايدار معادلات بقای ناوير-استوکس است که برای هر کميت φ به صورت زير بيان می‌شود] 25[:

|  |  |
| --- | --- |
| *(13)* |  |

کميت φ نشان دهنده متغیرهای هر فاز مانند ، Xi به ترتيب برای بقای اندازه حرکت و کسر جرمی است. جزء حجمی هر فاز، دانسیته مخلوط فازها،  سرعت فاز و ترم نفوذ می‌باشد] 26[.

در این مطالعه، روش اولرین فاز مایع و جامد را به عنوان سیال پیوسته در نظر می‌گیرد. همچنین از مدل syamlal-O’Brien برای ضریب تبادل[[10]](#footnote-10) مایع-جامد استفاده شده‌است. همچنین، از الگوريتم SIMPLE برای ارتباط فشار-سرعت استفاده شده و به منظور گسسته سازی مومنتوم از روش روبه بالای مرتبه دوم[[11]](#footnote-11) و به منظور گسسته­سازی جزء حجمی میکروذرات از روش QUICK استفاده شده‌است. محاسبات به­صورت ناپايدار با بازه زمانی 6-10 تا 3-10و با استفاده از فرمول ضمنی مرتبه دوم انجام گرفته و معيار همگرايي برای پارامترهای قابل پيش­بينی 5-10 و برای ترکيبات شيميايي 8-10 در نظر گرفته شده‌است. در این تحقیق، با توجه به این­که طبق نتایج آزمایشگاهی نقطه بهینه درصد حجمی میکروذرات %15 بوده‌است، بنابراین مدل­سازی دو فازی برای 15%درصد حجمی میکروذرات انجام شده‌است. روش تعریف میکروذرات به این شکل است که محلول درون میکروکانال فاز مایع و میکروذرات به صورت شیشه ای در نظر گرفته شده‌اند. ابتدا ناحیه کوچکی در درون میکروکانال پچ[[12]](#footnote-12) شده و میکروذرات در این ناحیه تعریف می‌شوند. با توجه به این که در کار آزمایشگاهی، ورودی میکروذرات، استوانه‌های کوچک بالای لوله اصلی میکروکانال بوده‌است و میکروذرات به درون لوله ی اصلی میکروکانال ریخته می­شدند، بنابراین قسمتی از لوله ی اصلی میکروکانال تکه شده‌است.

**7- بحث و نتایج**

**7-1- رفتار هیدرودینامیکی راکتور بستر­سیال**

مدل­سازی در دبی­های مختلف برای جریان­های ورودی شد. نتایج به­دست آمده به صورت گرافیکی ترسیم شده و در ادامه تحلیل شده­است.

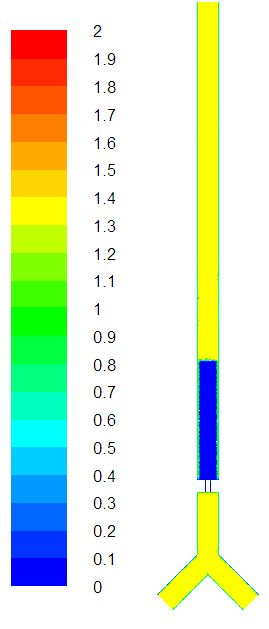
شکل­3 (الف) نتایج مدل­سازی CFD اثر دبی جریان ورودی بر نحوه پراکندگی نانوذرات را نشان می­دهد. کل دو جریان ورودی از nL/min 200 تا nL/min 1600 متغیر است. به منظور تصدیق اختلاط دو جریان، نتایج عددی با تصاویر واقعی ]18 [حرکت سیال درون کانال اختلاط مقایسه گردید.

|  |  |
| --- | --- |
| (الف) | (ب) |

شکل 3. الف) نتایج مدل سازی CFD اثر دبی جریان ورودی بر نحوه پراکندگی نانوذرات در راکتور میکروسیال، ب) نتایج آزمایشگاهی اثر دبی جریان بر پراکندگی نانوذرات در راکتور میکروسیال ]18[.

همان طور که شکل 3 نشان می­دهد با افزایش دبی جریان­های ورودی، پراکندگی نانوذرات در راکتور بستر سیال افزایش می­یابد. نکته­ای که در مدل­سازی CFD قابل توجه است این است که مدل­سازی ذرات جامد با روش اولرین تنها می­تواند پراکندگی نانوذرات را به صورت یک بستر نشان دهد. درواقع، این روش نمی­تواند ذرات را به صورت تکی و مجزا مدل­سازی کند چون فاز دوم را به عنوان یک فاز پیوسته در نظر می­گیرد. به هر حال، مدل­سازی CFD انجام شده به خوبی توانسته که پراکندگی ذرات و همچنین اثر دبی جریان سیال بر آن را پیش­بینی کند.

شکل4 نتایج مدل­سازی CFD و کانتور سرعت درون میکروکانال بستر­سیال را نشان می­دهد.



شکل 4. نتایج مدل سازی CFD کانتور سرعت در راکتور میکروسیال

**7-2- بررسی اختلاط میکروکانال بستر­سیال**

شکل5 ( الف) نتایج مدل­سازی اختلاط اتانول و اتانول آبی رنگ را در سه دبی مختلف نشان می­دهد. اثر دبی کل دو جریان ورودی شامل nL/min 800، nL/min 1200 و nL/min 1600 بررسی شده­است. به منظور تصدیق اختلاط دوجریان، نتایج عددی با تصاویر واقعی ]18 [اختلاط سیال درون کانال اختلاط مقایسه گردید. شکل 5 ( ب) اثر دبی جریان ورودی بر اختلاط اتانول و اتانول آبی رنگ را به صورت آزمایشگاهی بر طبق کار آزمایشگاهی Zivkovic و همکاران ]18[ نشان می­دهد.

|  |  |
| --- | --- |
| (الف) | (ب) |

شکل 5. الف) نتایج مدل سازی CFD اثر دبی جریان ورودی بر اختلاط در میکروکانال بستر سیال، ب) نتایج آزمایشگاهی اثر دبی جریان بر اختلاط در میکروکانال بستر سیال]18[.

همان طور که شکل 5 نشان می­دهد با افزایش دبی جریان­های ورودی، پراکندگی رنگ آبی در راکتور بستر سیال افزایش می­یابد و درواقع به معنای افزایش اختلاط درون میکروکانال است.

در پایان، کانتورهای غلظت اتانول آبی رنگ در چهار دبی مورد نظر برای دو جریان به صورت سیاه و سفید از نرم افزار فلوئنت استخراج شد و با استفاده از نرم­افزار Image-J پارامتر بازده اختلاط(η) طبق رابطه (3) بر اساس شدت مقیاس خاکستری محاسبه شد. به علت زیاد بودن داده­ها و به منظور مقایسه با نتایج آزمایشگاهی، نتایج CFD بازده اختلاط(η) با استفاده از دستور Plot در نرم­افزار فلوئنت به صورت نموداری ترسیم شد که در شکل 6 قابل مشاهده است.

|  |  |
| --- | --- |
| (الف) | (ب) |

شکل 6.. الف) نتایج مدل سازی CFD اثر ارتفاع اولیه بستر بر فاکتور اختلاط در میکروکانال بستر سیال، ب) نتایج آزمایشگاهی اثر ارتفاع اولیه بستر بر فاکتور اختلاط در میکروکانال بستر سیال ]18[.

شکل 6 نشان می­دهد با افزایش سرعت سیال ورودی، به علت افزایش آشفتگی درون میکروکانال، اختلاط اتانول و اتانول رنگی بهتر شده و اختلاط افزایش می­یابد. کانتورهای غلظت اتانول آبی رنگ در چند سرعت مختلف برای دو جریان به صورت سیاه و سفید از نرم­افزار فلوئنت استخراج شد و با استفاده از نرم­افزار Image-J پارامتر بازده اختلاط(η) محاسبه شد.

شکل 7 تغییرات شاخص اختلاط با سرعت ورودی برای هم بستر میکروفلوئیدی ذراّت شیشه­ای µm 5.29 و هم برای میکروکانال بدون ذره در یک فاصله از توزیع­کننده را نشان می­دهد. شاخص اختلاط برای کانال از حدود 5/0 در سرعت سطحیµm/s 100 به حدود 3/0 در سرعت سطحی µm/s 350 کاهش یافت و کاهش ملایم آن ناشی از وابستگی­اش به سرعت سطحی و تغییر فاصله از توزیع­کننده به واسطه­ی مساوی شدن آن با تغییرات RoI در بستر فلوئیدی بود. در مقابل شاخص اختلاط µFB با سرعت سطحی تغییر بسیار کمی کرد و در ابتدا از 97/0 در کمترین سرعت سطحی µm/s 95 به ماکزیمم تقریباً 99% در سرعت نهایی µm/s 190 افزایش یافت. قبل از افت دوباره با افزایش سرعت فلوئید تا 90/0 برای بیشترین سرعت مورد نظر در اینجا ضعیف شد. این روند برای دو اندازه­ی دیگر ذره که در اینجا مطالعه شد بسیار شبیه بود. این تحلیل بسیار ساده بهترین نقطه­ی عامل µFB را نشان داد که برابر با سرعت فلوئیدی ورودی واسطه و سرعت جریان بود.

|  |  |
| --- | --- |
| (الف) | (ب) |

شکل 7. الف) نتایج مدل سازی CFD اثر دبی جریان ورودی بر اختلاط در میکروکانال بسترسیال، ب) نتایج آزمایشگاهی اثر دبی جریان بر اختلاط در میکروکانال بسترسیال]18[.

**8-نتیجه گیری**

شرايط و نحوه اختلاط بر نتيجه و عملکرد بسياری از فرآيندهای صنعتی تاثیر گذار است. هدف از این مطالعه بررسی استفاده از مدل سازی CFD در شبیه‌سازی اختلاط میکرو در میکروکانال بسترسیال است. در ابتدا، یک میکروکانال بسترسیال که عمل اختلاط در آن انجام می­شد، مورد بررسی قرار گرفت. ترکيبات مورد استفاده در انجام مدل سازی انتقال جرم و اختلاط، شامل اتانول، اتانول رنگی و میکرو­ذرات شیشه ای در بخش مواد تعريف شده و ويژگی‌های فيزيکی مربوط به هر يک معرفی گرديد. به منظور اختلاط بیشتر توزیع کننده­هایی در مسیر ورودی مواد به میکروکانال قرار گرفت. همچنین، از الگوريتم SIMPLE برای ارتباط فشار-سرعت استفاده شده است. در این کار اختلاط درون یک راکتور بستر سیال به صورت سه بعدی با مدل سازی CFD مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه از مدل اولرین برای مدل سازی دو فاز مایع و جامد(بستر­سیال) استفاده شد. پروفایل های غلظت اتانول رنگی و بردارهای سرعت به خوبی هیدرولیک جریان و میزان انتقال جرم را نشان داد. در ادامه اثر سرعت جریان ورودی بر فرآیند اختلاط اتانول و اتانول رنگی در میکروکانال بستر­سیال بررسی گردید. همچنین اثر سرعت ورودی روی پراکندگی بسترسیال بررسی شد. نتایج نشان داد که با افزایش سرعت جریان ورودی مقدار پراکندگی میکروذرات افزایش پیدا کرد. نتایج حاصل از مدل سازی CFD با نتایج آزمایشگاهی موجود در یک منبع معتبر مقایسه گردید و تطابق خوبی با داده های آزمایشگاهی مشاهده گردید.

**CFD modeling of mixing in a fluidized bed microchannel**

**Yegane Davoodbeygi\*1, Neda Azimi2, Armin Sabetghadam-Isfahani3,4, Parnia Torabi5**

1Assistant Professor of Chemical Engineering, University of Hormozgan, Bandar Abbas, Iran

2Assistant Professor of Chemical Engineering, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah,

3PhD Candidate of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan. Iran

4Persian Gulf Star Oil Company (PGSOS), Bandar Abbas, Iran

5 Masters of Chemical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran.

**Abstract:**

The aim of this study was to investigate the use of CFD modeling in simulation of mixing in a fluidized bed microchannel. In the microchannel, distributors were placed in the material inlet path for further mixing. CFD modeling of hydrodynamic and mixing was performed and Eulerian model was used for modeling of two liquid and solid phases (fluidized bed). Concentration profiles and velocity contours showed good hydraulic flow. Then, the effect of velocity of inlet flow on the mixing process of ethanol and colored ethanol in the microchannel was investigated. The effect of the flow velocity on fluidized bed dispersion was also investigated. The results showed that with increasing the flow velocity, the amount of microparticle dispersion increases. The results of CFD modeling were compared with the experimental results in a valid reference and a good agreement was observed.

**Keywords:** CFD modeling, microchannel, mixing, fluidized.

**منابع**

[1] K. Kunowa, S. Schmidt – Lehr, W. Pauer, H. Maritz, C. Schwede, characterization of mixing efficiency in polymerization reactors using competitive – parallet reactions, Macromol. Symp. 259 (2007) 32-41.

[2] Y. Ying, G. Chen, Y. Zhao, S. Li, Q. Yuan, Ahigh throughput methodology for continuous preparation of monodis persed nanocrystals in microfluidic reactors, Chem. Eng. J. 135 (2009) 460-473.

[3] G.S. Jeong, S, Chung, C. Kim, S. Lee, Applications of micromixing Technology, Analyst 13 (2010) 460-473.

[4] E.L.paul, V.A.Atiemo- obeng, S.M. Kresta, Handbook of industrial mixing: Science and practice, PP. 20-24, Hoboken, New Jersey: John Wiley, Sons, 2004.

[5] T. Meyer, R. David, A. Renken, J. Villermaux, Micromixing in a static mixer and an empty tube by a chemical method, chem. Eng. Sci., 43 (1988) 1955-1960.

[6]N. Azimi, M. Rahimi, N.Abdollahi, Using magnetically excited nanoparticles for liquid–liquid two-phase mass transfer enhancement in a Y-type micromixer, Chemical Engineering and Processing: Process Intensification .97 (2015) 12-22.

[7] Kumar, V., M. Paraschivoiu, and K. Nigam, Single-phase fluid flow and mixing in microchannels. Chemical Engineering Science, 2011. 66(7): p. 1329-1373.

[8] C. Cao, Y. Wang, J.D. Holladay, E.O. Jones, D.R. Palo. "Design of Micro-Scale Fuel Processors Assisted By Numerical Modeling", AICHE Journal, 51(2005), 982-988.

[9] Mills, P. L., Quiram, D. J., & Ryley, J. F. (2007). Microreactor technology and process miniaturization for catalytic reactions-A perspective on recent developments and emerging technologies. Chemical Engineering Science,62(24), 6992-7010.

[10] J. M. Coulson, J. F. Richardson. 10. In Coulson & Richardsons Chemical Engineering. vol. 3, Chemical and Biochemical Reactors and Process Control. Elsevier, 1994. ISBN ‎9780080410036.

[11] Schiller L., Naumann Z., A drag coefficient correlation, Z. Ver. Deutsch. Ing 77 (1935) 318-320.

[12] Xinhua Liu, Guangwen Xu, Shiqiu Gao, 2007. Micro fluidized beds: Wall effect and operability, Chemical Engineering Journal 137 (2008) 302–307

[13] Qing jie Guo, Yiquan Xu, Xuehai Yue, 2009. Fluidization Characteristics in Micro-Fluidized Beds of Various Inner Diameters, Chem. Eng. Technol. 2009, 32, No. 12, 1992–1999.

[14] Bertsch, A., Heimgartner, S., Cousseau, P., & Renaud, P. (2001). Static micromixers based on large-scale industrial mixer geometry. Lab on a Chip, (1), 56-60.

[15] Mouheb, N. A., Malsch, D., Montillet, A., Solliec, C., & Henkel, T. (2012). Numerical and  
experimental investigations of mixing in T-shaped and cross-shaped micromixers. Chemical  
engineering science, 68 (1), 278-289.

[16] N. Solehati, J. Bae, A. P. Sasmito, Numerical investigation of mixing performance in microchannel T-junction with wavy structure, Computers & Fluids, Vol. 96, No. 1, pp. 10-19, 2014.

[17] A. G. Kanaris, I. A. Stogiannis, A. A. Mouza, S. G. Kandlikar, Comparing the mixing performance of common types of chaotic micromixers: A numerical study, Heat Transfer Engineering, Vol. 36, No. 13, pp. 1122-1131, 2015.

[18] V.Zivkovic, N.Ridge, M.J. Biggs, 2017. Experimental study of efficient mixing in a micro-fluidized bed, Applied Thermal Engineering 2017.08.144.

[19] E. Doroodchi, M. Sathe, G. Evans, B. Moghtaderi, Liquid–liquid mixing using micro-fluidised beds, Chemical Engineering Research and Design, 91 (2013) 2235-2242.

[20] N. Kockmann, T. Kiefer, M. Engler, P. Woias, Convective mixing and chemical reactions in microchannels with high flow rates, Sensors and Actuators B: Chemical, 117 (2006) 495-508.

[21] J.F. Richardson, W.N. Zaki, The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow, Chemical Engineering Science, 3 (1954) 65-73.

[22] L. Falk, J.M. Commenge, Performance comparison of micromixers, Chemical Engineering Science, 65 (2010) 405-411.

[23] J.M. Ottino, W.E. Ranz, C.W. Macosko, A lamellar model for analysis of liquid-liquid mixing, Chemical Engineering Science, 34 (1979) 877-890.

[24] M.A. Margulis, I.M. Margulis, “Calorimetric method for measurement of acoustic power absorbed in a volume of a liquid”, Ultrasonics Sonochemistry. 10 (2003) 343–345.

[25] E.B. Nauman, “Chemical Reactor Design, Optimization, and Scaleup”, 2nd edition Wiley & Sons, 2008.

[26] R.J.G. Lopes, R.M. Quinta-Ferreira, “Trickle-bed CFD studies in the catalytic wet oxidation of phenolic acids”, Chemical Engineering Science. 62 (2007) 7045–7050.

1. Eulerian [↑](#footnote-ref-1)
2. Micro-Fluidized Bed (μFB) [↑](#footnote-ref-2)
3. Voidage [↑](#footnote-ref-3)
4. 1Species [↑](#footnote-ref-4)
5. 2Mixing law [↑](#footnote-ref-5)
6. 1 Dilute-approximation [↑](#footnote-ref-6)
7. Laminar [↑](#footnote-ref-7)
8. Eulerian [↑](#footnote-ref-8)
9. Granular flow [↑](#footnote-ref-9)
10. Exchange coefficient [↑](#footnote-ref-10)
11. 5Two order upwind [↑](#footnote-ref-11)
12. Patch [↑](#footnote-ref-12)