

بررسی شبیه‌سازی CFD راکتورهای سه فازی و چالش‌های پیش‌رو

صادق پهلوانی، سیدحسین هاشم‌آبادی*

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

پیم‌نگار: Hashemabadi@iust.ac.ir

چکیده

با توجه به اهمیت و جایگاه راکتورهای شیمیایی در واحدهای مختلف صنایع نفت، گاز و پتروشیمی و نقش کلیدی آنها، بررسی و تعیین شرایط بهینه عملیاتی حائز اهمیت است. تحلیل و ارزیابی نحوه اختلاط و پدیده‌های انتقال (جرم، گرما و مومنتوم) در شرایط عملیاتی متفاوت و انواع مختلف راکتورها از قبیل راکتورهای بستر دار و راکتورهای (دوغابی- حبابی) با هندسه‌های متنوع و در حضور و عدم حضور تجهیزات جانبی مثل بافل‌ها، تعداد و اشکال مختلف پره‌های همزن و دیگر تجهیزات و شرایط خاص، به منظور یافتن شرایط بهینه عملیات بسیار مفید و مؤثر است. در این مقاله به بررسی و تحلیل کارهای CFD انجام شده بر روی راکتورهای سه فازی در دو دهه اخیر پرداخته می‌شود. بیشتر مطالعات اخیر انجام شده، مستقیماً بر روی کمی‌سازی ساختار جریان و تعیین الگوی جریان متمرکز است که اغلب این کارها مبتنی بر شرایط پایه، هندسه دو بعدی با فرض تقارن محوری و مدل چندفازی (اولرین-اولرین) می‌باشد. در حالی که اساساً جریان سه فازی در راکتورها، ترکیبی از پدیده‌های مختلف است که در زمان‌ها و مقیاس‌های طولی متفاوت رخ می‌دهد و منجر به یک رژیم ناپایا در جریان سیال می‌شود و شرایط دینامیکی ناپایا، فرایندهای اختلاط و انتقال را تحت تاثیر قرار می‌دهد. به خصوص در راکتورهای حبابی و دوغابی، این شرایط به شدت وابسته به پارامترهای طراحی و عملیاتی سیستم مانند نحوه ورود فازها، نرخ جریان گاز و بار ذرات جامد می‌باشد. کارهای انجام شده نشان می‌دهند. هیدرودینامیک پیچیده این نوع راکتورها، به خوبی مشخص نشده است. علت این امر نیز پیچیدگی برهم کنش‌های بین فازی (جامد- جامد)، (جامد- مایع) و (جامد- حباب) می‌باشد. در مقالات موجود به ندرت می‌توان کاری را دید که در آن به مطالعه هیدرودینامیک جریان به صورت سه بعدی، ناپایا و همراه با بار زیاد ذرات جامد پرداخته شده باشد.

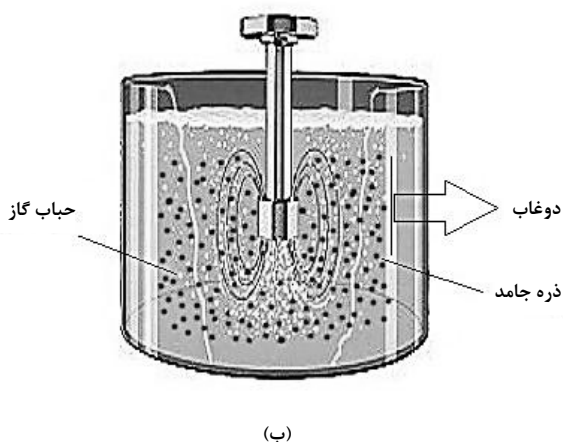
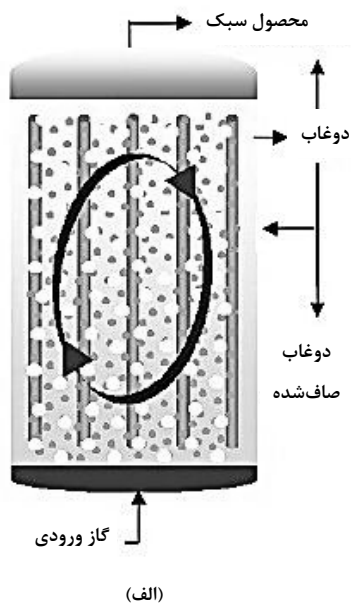
کلمات کلیدی: راکتورهای سه فازی، شبیه‌سازی CFD، هیدرودینامیک، جریان‌های چند فازی، مدل‌های اغتشاش

۱- مقدمه

تاسیسات واحدهای مرتبط با صنایع نفت، گاز و پتروشیمی به هدر می‌رود. یکی از عمده ترین دلایل این امر، نبود اطلاعات آزمایشگاهی و شبیه‌سازی نیمه صنعتی به منظور طراحی صحیح و بهینه می‌باشد، که خود این مسئله نیز ناشی از هزینه‌های هنگفت مورد نیاز برای شبیه‌سازی‌های معمولاً وقت گیر آزمایشگاهی است. یکی از مهمترین فاکتورهای مهم در طراحی مناسب و همچنین رفع

با افزایش رو به رشد نیاز جهانی به انرژی، ضرورت بازنگری و تجدید نظر در نحوه طراحی و ساخت تاسیسات واحدهای صنعتی به خصوص در صنایع نفت، گاز و پتروشیمی، امری اجتناب ناپذیر است. سالیانه هزینه‌های کلانی به دلایل مختلف، از جمله عدم طراحی بهینه، به روز و مطابق با استانداردهای بین‌المللی، در تجهیزات و

راکتورها، به منظور استفاده از فرصت‌ها و توانمندی‌های موجود جهت افزایش سطح انتقال گرما، انتقال جرم، اختلاط و فرایندهای واکنش افزایش یافته است [۱].



شکل ۱- نمایشی از انواع راکتورهای (دوغابی- حبابی): (الف) راکتور (دوغابی- حبابی)، (ب) راکتور (دوغابی- حبابی) همزده

۳- تحقیقات اخیر در زمینه راکتورهای سه فازی

به طور کلی مطالعات CFD به منظور بررسی موضوعات عمده‌ای از قبیل هیدرودینامیک جریان، انتقال جرم، گرما و واکنش‌های شیمیایی انجام می‌شود. تحقیقات اخیر در زمینه راکتورهای شیمیایی سه فازی روی موضوعات مختلفی مطابق جدول (۱) تمرکز دارد [۱۹].

اشکالات احتمالی در حین عملیات راکتور، صرفه نظر از شرایط سینتیکی واکنش، تعیین وضعیت هیدرولیکی جریان فازهای موجود در راکتور می‌باشد. از آنجا که تعیین پارامترهای مهم هیدرولیکی به صورت تجربی، بسیار پیچیده و نیازمند انجام آزمایشات مختلف است، لذا از تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی می‌توان به منظور شبیه‌سازی راکتور با صرف هزینه اندک استفاده کرد. در این مقاله، هدف، مطالعه و بررسی کارهای انجام شده در زمینه شبیه‌سازی‌های راکتورهای چند فازی با تکنیک‌های CFD می‌باشد.

۲- انواع راکتورهای سه فازی

راکتورهای شیمیایی از این جهت که اجزای موجود در درون راکتور، شامل چند فاز هستند؛ به راکتورهای دوفازی و سه فازی تقسیم می‌شوند. در این مقاله به بررسی کارهای انجام شده بر روی راکتورهای سه فازی می‌پردازیم. راکتورهای سه فازی کاربرد وسیعی در صنایع شیمیایی، پتروشیمی، پالایش، داروسازی، زیست‌تکنولوژی، غذا و محیط زیست دارند. این راکتورها را بر اساس چگالی و کسر حجمی ذرات می‌توان به دو دسته کلی زیر تقسیم کرد:

۱) راکتورهای (دوغابی- حبابی)

(الف) راکتورهای (دوغابی- حبابی)^۱

(ب) راکتورهای (دوغابی- حبابی) همزده^۲

۲) راکتورهای بستردار

(الف) راکتورهای سیال بستر^۳

(ب) راکتورهای ثابت بستر^۴

(ج) راکتورهای با بستر قطره‌ای^۵

در شکل (۱)، نمایشی از راکتورهای (دوغابی- حبابی) را مشاهده می‌کنید. در شکل (۲) نیز نمونه‌هایی از انواع راکتورهای بستردار نشان داده شده است. در ادامه به بررسی این راکتورها می‌پردازیم.

در سال‌های اخیر، مطالعه خصوصیات هیدرودینامیک سیالیت سه فازی، به صورت قابل توجه بر روی مطالعه جریان‌های چندفازی در

1. Slurry Bubble Reactors
2. Mixed Slurry Bubble Reactors
3. Fluidized Bed Reactors
4. Fixed Bed Reactors
5. Trickle Bed Reactors

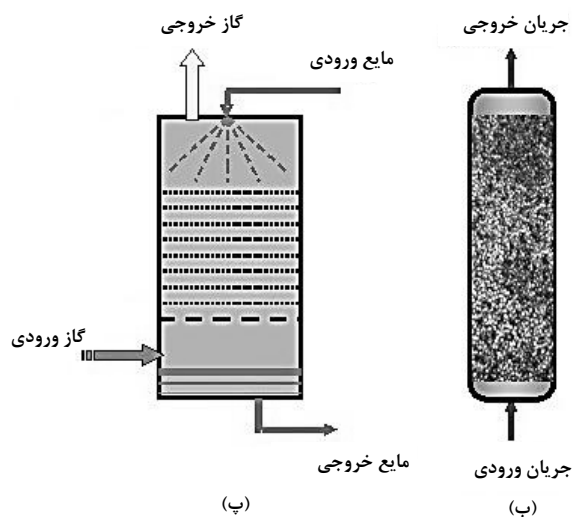
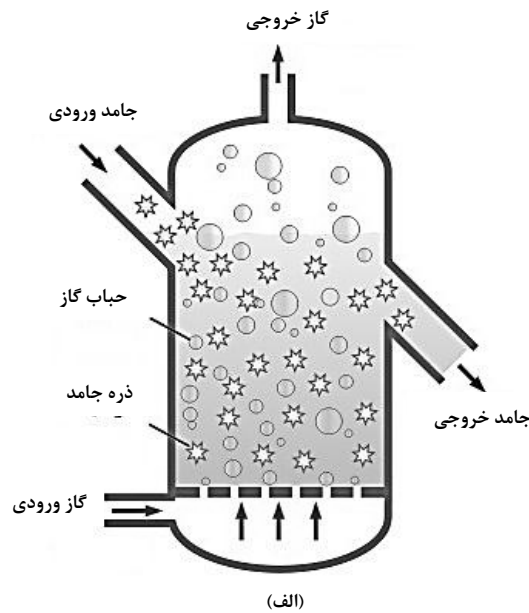
جدول ۱- موضوع تحقیقات اخیر در زمینه راکتورهای سه فازی

پارامترهای مورد بررسی	موضوع تحقیقات
ماندگی متوسط فازها به صورت کلی و محلی	۱. کمی‌سازی ساختار جریان ^۱
سرعت فازهای مختلف در شرایط و پارامترهای عملیاتی متفاوت	
تعیین الگوی جریان و نحوه گذار در رژیم‌های مختلف	۲. شناسایی رژیم جریان ^۲
توسعه الگوی جریان برای سیستم‌های مختلف	
طراحی دقیق	۳. رویکردهای مدل‌سازی پیشرفته ^۳
افزایش مقیاس	

کارهای عددی دوفازی در زمینه مدل‌سازی رفتار جریان در راکتورها از اواخر دهه ۵۰ و اوایل دهه ۶۰ میلادی آغاز شد. شروع کارهای عددی سه فازی در زمینه مدل‌سازی رفتار و ساختار جریان در راکتورها نیز به اواخر دهه ۷۰ بر می‌گردد. با پیشرفت سیستم‌های رایانه‌ای و ظهور پردازنده‌های قدرتمند، شرکت‌های بزرگ به فکر ایجاد بسته‌های نرم افزاری تجاری جهت انجام محاسبات مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار جریان افتادند. به این ترتیب در اوایل دهه ۹۰ میلادی کارهای سه فازی به منظور شبیه‌سازی رفتار جریان در راکتورها آغاز گردید. قبل از پرداختن به این کارها، ابتدا لازم است یک دسته بندی از انواع سیستم‌های سه فازی داشته باشیم. در جدول (۲) تقسیم‌بندی ساده‌ای از راکتورهای سه‌فازی ارائه شده است.

عمده کارهایی که در این مقاله مورد بررسی قرار می‌گیرند، به دو دسته اول مربوط می‌شود.

1. Flow Structure Quantification
2. Flow Regime Identification
3. Advanced Modeling Approaches



شکل ۲- نمایشی از انواع راکتورهای بستردار: (الف) راکتور سیال بستر (ب) راکتور ثابت بستر (پ) راکتور بستر قطره‌ای

علی‌رغم اینکه بیشتر مطالعات تجربی انجام شده، مستقیماً بر روی کمی‌سازی ساختار جریان و تعیین الگوی جریان متمرکز است، اما هیدرودینامیک پیچیده این نوع راکتورها، به خوبی مشخص نشده است. علت این امر نیز پیچیدگی برهم کنش‌های بین فازی (جامد-جامد)، (جامد-مایع) و (جامد-حباب) می‌باشد. با پیشرفت تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی، CFD به عنوان ابزاری مفید و مؤثر در راستای دو هدف طراحی دقیق و افزایش مقیاس مورد استفاده قرار گرفت.

۱-۳ سیر زمانی تحقیقات

شد. در ادامه به بررسی کارهای سه فازی انجام شده در دو دهه اخیر، از سال ۱۹۹۰ تا سال ۲۰۱۰، می‌پردازیم. در جدول (۳) بخش عمده‌ای از این کارها آمده است.

همانطور که پیشتر گفته شد، با رشد روش‌های عددی و پیشرفت‌های کامپیوتری این روش‌ها توسعه پیدا کرد، تا اینکه در اوایل دهه نود اولین کارهای مربوط به راکتورهای سه فازی انجام

جدول ۲- انواع راکتورهای سه‌فازی

دسته	نوع فازها	نمونه‌ای از فرایندهای این راکتورها
۱	(جامد- مایع- گاز)	اکسایش (پارا- زایلن) به تری فتالیک اسید
۲	(جامد- جامد- مایع)	کریستالیزاسیون هیدرات آلومینات سدیم در مخزن همزده
۳	(مایع- مایع- جامد)	هیدروژن دار کردن روغن مایع با کاتالیست هموزن روغن مایع
۴	(جامد- جامد- گاز)	سنتز متانول از اکسایش متان در بستر ثابت

جدول ۳- سیر زمانی تحقیقات انجام شده بر روی راکتورهای سه فازی

مرجع	هدف شبیه‌سازی	فرضیات شبیه‌سازی	مدل‌ها	نوع راکتور
بهاری و همکاران ^۳ ۱۹۹۴	بررسی رژیم‌های جریان‌ی مختلف در بستر سیال و مقایسه نتایج با داده‌های تجربی سرعت و ماندگی فازها	شبیه‌سازی دو بعدی به صورت متقارن ^۱ و تقارن محوری ^۲ ، استفاده از مدل KTGF برای فاز جامد	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور سیال‌بستر سه فازی
گروست ^۴ و همکاران ۱۹۹۶	ارائه مدل برای توزیع اندازه‌ی حباب با بررسی پارامترهای توزیع اندازه‌ی حباب‌ها، گردش مایع و حرکت فاز جامد	شبیه‌سازی به صورت پایا، دو بعدی و فاز مایع همراه با ذرات جامد به عنوان یک فاز همگن با دانسیته و ویسکوزیته مخلوط	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی
مجامدر ^۵ و همکاران ۱۹۹۷	تعیین هیدرودینامیک جریان با بررسی نیمرخ‌های ماندگی فازهای گاز و جامد و پارامترهای سرعت ظاهری فاز مایع و گاز و سرعت چرخشی فاز جامد	شبیه‌سازی به صورت دو بعدی و تقارن محوری و جریان سه فازی (آب- شیشه دانه- هوا) ^۵ در یک ستون عمودی	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی
جیانپینگ و شونگ‌لین ^۷ ۱۹۹۸	تعیین تغییرات محلی نیمرخ‌های سرعت محوری فاز مایع و ماندگی فاز گاز در سیستم سه فازی همزمان و مقایسه اثرات بار جرمی جامد روی سرعت محوری فاز مایع و ماندگی فاز گاز	شبیه‌سازی به صورت پایا، دو بعدی و فاز مایع همراه با ذرات جامد به عنوان یک فاز همگن با چگالی و گرانشی مخلوط	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی

1. Symmetric
5. Air-Water-Glass Beads

2. Axisymmetric
6. Majumdar et al

3. Bahary et al
7. Jianping & Shonglin

4. Grevskott et al

(ادامه) جدول ۳- سیر زمانی تحقیقات انجام شده بر روی راکتورهای سه فازی

مرجع	هدف شبیه‌سازی	فرضیات شبیه‌سازی	مدل‌ها	نوع راکتور
لی ^۱ و همکاران ۱۹۹۹	بررسی رفتار حباب‌های گاز حین عبور از یک بستر (جامد-مایع) با بررسی پارامترهای رفتار گردابه ای حباب‌ها و Entrainment ذرات	شبیه‌سازی به صورت دوبعدی و جریان سه فازی (هوا-آب-شیشه دانه) در یک ستون عمودی	(اولرین-لاگرانژین) و (k-ε)	راکتور سیال‌بستر سه فازی
پادیال ^۲ و همکاران ۲۰۰۰	تاثیر موقعیت Draft-Tube روی پایداری چرخش مایع با بررسی پارامترهای کسر حجمی فاز گاز و چرخش محوری فاز مایع	شبیه‌سازی به صورت سه بعدی، شرایط مرزی شامل free slip و inflow، شرط مرزی free slip برای تمام سطوح به جز ورودی‌ها، خروجی‌ها و دیواره Draft-Tube	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی با (Draft-Tube)
ماتونیس ^۳ و همکاران ۲۰۰۲	تعیین هیدرودینامیک جریان با بررسی تغییرات نیمرخ ماندگی فازها و سرعت متوسط فاز جامد و بررسی تنش‌های رینولدز برشی و نرمال	شبیه‌سازی به صورت سه بعدی و شرایط ناپایا و استفاده از مدل KTGF ^۳ برای توصیف توربولنسی فاز ذرات	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی
فنگ ^۵ و همکاران ۲۰۰۵	تعیین هیدرودینامیک جریان با بررسی اثر پارامترهای عملیاتی، بر تغییرات محوری نیمرخ ماندگی فاز گاز و سرعت محلی فاز مایع	شبیه‌سازی پایا و ناپایا، سه بعدی و فاز مایع همراه با ذرات جامد به عنوان یک فاز همگن با چگالی و گرانیوی مخلوط	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی
اسکالنبگ ^۷ و همکاران ۲۰۰۵	تعیین هیدرودینامیک جریان با بررسی تغییرات پروفایل ماندگی فازها و سرعت محلی فاز مایع	سیستم سه فازی شامل (هوا-آب-ذرات جامد) و شبیه‌سازی ناپایا، به صورت سه بعدی، شرط مرزی روی دیواره‌ها برای مایع No Slip و برای گاز و جامد Free Slip، شرط مرزی در دهانه بالایی ستون به صورت دیواره نیمه تراوا و بدون تنش برشی	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی
ژانگ ^۸ و احمدی ۲۰۰۵	بررسی نحوه تغییرات الگوی جریان با تغییر اندازه حباب‌های گاز با بررسی سرعت لحظه‌ای حباب‌های گاز، سرعت لحظه‌ای ذرات جامد و سرعت جریان مایع	شبیه‌سازی به صورت ناپایا، دو بعدی و استفاده از Analysis Lagrangian Trajectory برای تعیین حرکات حباب‌ها و ذرات جامد	(اولرین-لاگرانژین) و (k-ε)	راکتور ستون حبابی سه فازی
مُرسی ^۹ و همکاران ۲۰۰۷	پیش‌بینی سرعت بحرانی برای تعلیق ذرات جامد در مخزن و بررسی نحوه تغییرات الگوی جریان با تغییر اندازه حباب‌ها	شبیه‌سازی به صورت پایا و برای دو حالت دو و سه فازی و شبیه‌سازی همزن با دیدگاه MRF و کد نویسی در فلوئنت	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور مخزن همزده سه فازی

1. Li et al.
5. Feng et al.
9. Murthy et al.

2. Padial et al.
6. Solid Particles-Air-Water

3. Matonis et al.
7. Schallenberg et al.

4. Model Kinetic Theory Granular
8. Zhang and Ahmadi

(ادامه) جدول ۳- سیر زمانی تحقیقات انجام شده بر روی راکتورهای سه فازی

مرجع	هدف شبیه‌سازی	فرضیات شبیه‌سازی	مدل‌ها	نوع راکتور
پانی‌سلوام ^۱ و همکاران ۲۰۰۹	پیش‌بینی خصوصیات هیدرودینامیک جریان سه فازی با بررسی پارامترهای سرعت محلی و ماندگی فازهای مایع و گاز در راستای شعاعی و سرعت‌های متوسط محوری فاز جامد	شبیه‌سازی به صورت ناپایا، برای حالت‌های دو بعدی و سه بعدی، هر سه فاز به صورت پیوسته و دارای برهم کنش با همدیگر در تمام دامنه عملیاتی	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور بستر سیال سه فازی
لوپز ^۲ و همکاران ۲۰۰۹	پیش‌بینی خصوصیات هیدرودینامیک جریان سه فازی و تعیین اثرات شدت جریان‌های فازهای گاز و مایع، اثر هندسه و نوع توزیع‌کننده مایع، اثر فشار عملیاتی	شبیه‌سازی به صورت ناپایا، سه بعدی و ذرات کاتالیست (جامد) به صورت کروی و هم اندازه	(اولرین-اولرین) و (k-ε)	راکتور بستر قطره‌ای سه فازی
وانگ ^۴ و همکاران ۲۰۱۰	پیش‌بینی زمان اختلاط برای تعلیق ذرات جامد در مخزن، بررسی اثرات وجود Draft Tube بر رفتار سیستم و اثر بر هم کنش‌های بین فازی و الگوی جریان	شبیه‌سازی به صورت پایا، سه بعدی، جریان سه فازی در یک مخزن همزده (گلی‌سرایت- گل قرمز- شن) ^۳	(اولرین-اولرین) و RNG (k-ε)	راکتور مخزن همزده سه فازی

۳-۲ بررسی مطالعات انجام شده

مطابق جدول (۳)، بیشتر مطالعات CFD انجام شده مبتنی بر شرایط پایا، هندسه دو بعدی بصورت متقارن محوری^۵ و مدل چندفازی (اولرین-اولرین) می‌باشد. در حالی که اساساً جریان سه فازی در راکتورها ترکیبی از پدیده‌های مختلف است که در زمان‌ها و مقیاس‌های طولی متفاوت رخ می‌دهد و منجر به یک رژیم ناپایا در جریان سیال می‌شود. اغلب شرایط دینامیکی ناپایا، فرایندهای اختلاط و انتقال را تحت تاثیر قرار می‌دهند. این شرایط به شدت وابسته به پارامترهای طراحی و عملیاتی سیستم مانند چیدمان اسپارجرها، نرخ جریان گاز و بار ذرات جامد می‌باشد. در مقالات و گزارش‌های موجود به ندرت می‌توان کاری را دید که در آن به مطالعه هیدرودینامیک جریان سه فازی، ناپایا و همراه با بار زیاد ذرات جامد پرداخته شده باشد.

اولین کار سه فازی در زمینه شبیه‌سازی راکتورها، توسط بهاری و همکاران [۸] (۱۹۹۴) بر روی راکتور سیال‌بستر صورت گرفت. بهاری و همکاران یک ستون سه فازی را به صورت دو بعدی و در شرایط متقارن^۶ و متقارن محوری شبیه‌سازی کردند. در این سیستم فاز گاز به صورت ذرات ریز با قطر ۴ میلی‌متر بود و از مدل KTGF^۷ برای توصیف اغتشاش فاز جامد استفاده شد. نتایج حاصل، تطبیق خوب نتایج شبیه‌سازی سرعت و ماندگی فازها با اندازه‌گیری‌های تجربی را نشان داد. گریواسکات و همکاران [۲۰] (۱۹۹۶) با استفاده از مدل شبه دوفازی^۸ هیدرودینامیک جریان در یک راکتور ستون حبابی سه فازی را که فاز گاز به صورت حبابی در سیستم جریان داشت، بررسی کردند. آن‌ها مدلی برای توزیع اندازه حباب ارائه کردند که ضمن انطباق مناسب با داده‌های تجربی، پیشرفت تطبیقی خوبی نسبت به کارهای عددی قبلی ایجاد کرد.

مجومدار و همکاران [۲۱] (۱۹۹۷) با هدف بررسی هیدرودینامیک

1. Panneerselvam et al.
2. Lopes et al.
3. Glycerite-Red Mud-Sand
4. Wang et al.
5. Axisymmetric

6. Symmetric
7. Kinetic Theory Granular Flow Model
8. Pseudo-Two-Phase Fluid Dynamic

بعدی، مدل‌های (اولرین- لاگرانژی) را با مدل حجم سیال^۲ ترکیب کردند. در واقع آن‌ها برای تحلیل رفتار جریان مایع از روش اولر، تحلیل رفتار حباب‌های گاز از روش حجم سیال و برای تحلیل رفتار ذرات جامد از روش لاگرانژ بهره بردند. آن‌ها برهم کنش‌های (ذره- ذره) را با استفاده از مدل کره سخت^۳ و اثرات درون شبکه‌ای مایع بر روی ذرات جامد را نیز در نظر گرفتند. هم چنین در معادله موازنه نیروی فاز جامد نیروهای دراگ، جرم مجازی^۴ و بست^۵ (اثرات مایع روی جامد) را نیز لحاظ کردند. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی، از نظر رفتار گردابه‌ای حباب‌ها و گردش ذرات جامد در سیستم، تطبیق خوبی را در این کار نشان می‌دهد.

پادپال و همکاران [۲۴] (۲۰۰۰) اولین کار سه بعدی در زمینه شبیه‌سازی سه فازی راکتوری را ارائه دادند. آن‌ها با توسعه یک کد CFD جهت مش‌بندی ساختاریافته^۶ هندسه یک راکتور ستون حبابی سه فازی همراه با مدل کردن پدیده‌های فیزیکی شامل تبادل مقدار حرکت و توربولنسی ناشی از دو عامل برشی^۷ و لغزشی^۸ بین فازها و استفاده از یک ضریب به منظور لحاظ کردن نیروی جرم مجازی در معادله مقدار حرکت، به بررسی تاثیر موقعیت لوله القایی روی پایداری چرخش مایع در سیستم تحت شرایط پایا پرداختند. در این کار فاز گاز به صورت حبابی در سیستم در نظر گرفته شد. همچنین نیروی دراگ بین فاز مایع و حباب و بین فاز مایع و ذرات جامد را نیز در معادلات مقدار حرکت فازها با فرض ذرات کروی لحاظ کردند. نتایج شبیه‌سازی این کار با داده‌های تجربی، شامل جمله‌های کسر حجمی فاز گاز، چرخش محوری فاز مایع و جمله اتلاف چرخشی (هنگام کارکرد لوله القایی^۹ در بالاترین موقعیت مکانی) تطبیق خوبی دارد.

ماتونیس و همکاران [۲۵] (۲۰۰۲) به بررسی هیدرودینامیک جریان در یک راکتور ستون حبابی سه فازی پرداختند. در این کار همانند کار بهاری و همکاران [۸]، از مدل KTGF برای توصیف توربولنسی فاز ذرات استفاده شد. با این تفاوت که ماتونیس و همکاران با توسعه یک کد CFD برای حل معادلات (نویر- استوکس) کوپل برای هر

جریان در یک راکتور ستون حبابی سه فازی، جریان سه فازی در یک ستون عمودی را به صورت دو بعدی و متقارن محوری شبیه‌سازی کردند. برخلاف کارهای قبلی، آنها از یک مدل اصلاح شده بین فاز مایع و ذرات حباب، جهت تعیین اثر ذرات جامد روی مخلوط و یک مدل اصلاح شده دیگر بین فاز مایع و ذرات جامد را جهت تعیین اثر ذرات حباب روی مخلوط استفاده کردند. در واقع هدف آنها از انجام این کار، ارائه یک مدل جدید برای اصلاح نیروی دراگ (کشش) بین ترکیب‌های دو تایی فازها و لحاظ کردن اثر فاز سوم بر روی برهم کنش دو فاز دیگر بود. همچنین در مدل ارائه شده توسط آن‌ها، بر هم کنش‌های بین ذرات جامد با اصلاح نیروی دراگ اعمال شده بر روی فاز جامد، لحاظ شد. نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی شامل تغییرات محوری غلظت جامد و تغییرات شعاعی سرعت فازها تطبیق خوبی را نشان داد.

شانگلین و جیانپینگ [۲۲] (۱۹۹۸) با استفاده از مدل شبه دوفازی هیدرودینامیک جریان در یک راکتور ستون حبابی سه فازی، را بررسی کردند. در این کار، برخلاف کار گریواسکات و همکاران [۲۰] که آن‌ها هم از مدل دوفازی استفاده کرده بودند، اثرات بار جرمی جامد و سرعت‌های ظاهری فاز گاز و مایع روی سرعت محوری فاز مایع و ماندگی فاز گاز بررسی شد که نتایج حاصل در مقایسه با داده‌های تجربی سرعت (محوری- محلی) فاز مایع، ماندگی محلی فاز گاز و سرعت‌های ظاهری فاز مایع و گاز حاکی از تطبیق خوب نتایج شبیه‌سازی بود. در این کار به دلیل سرعت کم جریان فازها، فقط نیروی دراگ در معادلات مقدار حرکت وارد شده است.

لسی و همکاران [۲۳] (۱۹۹۹) برای اولین بار از مدل (اولرین- لاگرانژی)^۱ جهت بررسی رفتار حباب‌های گاز حین عبور از یک بستر سیال (جامد- مایع) عمودی استفاده کردند، این در حالی بود که در تمام کارهای قبلی از مدل (اولرین- اولرین) استفاده شده بود. علت این مسئله این بود که اساساً حل معادلات حاکم بر جریان فازها با مدل چند فازی (اولرین- اولرین) راحت‌تر و سریعتر به جواب می‌رسد. کاربرد مدل (اولرین- لاگرانژی) تابع هدف مورد نظر از شبیه‌سازی است، اگر هدف بررسی رفتار یک ذره از یک فاز در محیط فاز دیگر باشد به ناچار باید از مدل (اولرین- لاگرانژی) استفاده کرد. لی و همکاران در این کار با توسعه یک کد CFD دو

2. Volume of Fluid
3. Hard Sphere Model
4. Virtual Mass
5. Basset
6. Structured
7. Shear
8. Slip
9. Draft-Tube

1. Eulerian-Lagrangian

(حباب- حباب) از مدل کره سخت با فرض کروی بودن حباب‌ها و ناچیز بودن گوناگونی شکل آن‌ها استفاده شد. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی نشان دهنده تطبیق خوب نتایج شبیه‌سازی است.

مورتی و همکاران [۳] (۲۰۰۷) با استفاده از مدل (اولرین- اولرین)، تحت شرایط پایا و سه بعدی بر روی یک راکتور مخزن همزده سه فازی به منظور پیش‌بینی سرعت بحرانی برای تعلیق ذرات جامد در مخزن، مطالعه کردند. شبیه‌سازی‌های انجام شده به صورت دو و سه فازی انجام شد. اثرات برهم کنش‌های بین فازی در سیستم، با در نظر گرفتن نیروهای درگ، لیفت و جرم مجازی در معادله مقدار حرکت فازها لحاظ شد. در این کار به صورت جامع به بررسی اکثر پارامترهای مؤثر بر هیدرودینامیک جریان از قبیل قطر مخزن، قطر همزن، شکل، سرعت و محل همزن، بار و اندازه ذرات جامد، نوع طراحی اسپارجر و سرعت ظاهری گاز پرداخته شد. همچنین به منظور شبیه‌سازی رفتار همزن از دیدگاه MRF^۱ و کد نویسی در فلوئنت استفاده شد. نتایج حاصل نشان‌دهنده تطبیق خوب نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی، برای سرعت بحرانی همزن، در یک محدوده متفاوت اندازه و بار ذرات جامد، در طراحی‌های مختلف همزن و سرعت ظاهری متفاوت گاز بود.

پانیرسلووم و همکاران [۱۹] (۲۰۰۹) بر روی هیدرودینامیک جریان سه فازی در یک راکتور سیال‌بستر کار کردند. آن‌ها شبیه‌سازی را به صورت ناپایا و در حالت‌های دو و سه بعدی انجام دادند. در این کار هر سه فاز به صورت پیوسته و دارای برهم کنش با همدیگر در تمام دامنه عملیاتی در نظر گرفته شدند، هم چنین برهم کنش‌های (ذره- ذره) در معادله فاز جامد و نیروهای درگ، لیفت و جرم مجازی در معادله مقدار حرکت فازها وارد شد. پیش‌بینی خصوصیات هیدرودینامیک جریان شامل: سرعت‌های متوسط محوری فاز جامد، سرعت محلی و ماندگی فازها در راستای شعاعی برای فازهای گاز و مایع تطبیق خوبی با نتایج تجربی نشان داد.

لوپز و همکاران [۱۱] (۲۰۰۹) تحت شرایط ناپایا، سه بعدی و با فرض ذرات کاتالیست کروی و هم اندازه به صورت بستر جامد در ۱۷ لایه غیر تداخلی منظم به شبیه‌سازی راکتور بستر قطره‌ای پرداختند. آنها در معادله مقدار حرکت، فقط نیروی درگ را به عنوان نیروی‌های بین فازی وارد کردند. هدف این کار پیش‌بینی

فاز، شبیه‌سازی را به صورت سه بعدی و ناپایا انجام دادند. پارامتر اصلی ورودی کد، گرانشی فاز پراکنده (به صورت ذرات ریز) می‌باشد. در این کار نیز نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی، شامل جمله‌های سرعت و غلظت ذرات تطبیق خوبی دارد.

فنگ و همکاران [۲۶] (۲۰۰۵) با استفاده از مدل شبه دوفازی به شبیه‌سازی راکتور ستون حبابی سه فازی به صورت سه بعدی و در شرایط پایا و ناپایا پرداختند. آنها از یک کد CFD به منظور منفصل‌سازی معادلات دیفرانسیل حاکم بر سیستم که شامل نیروهای درگ، لیفت و جرم مجازی می‌باشد، استفاده کردند. بررسی اثر پارامترهای عملیاتی، بر تغییرات محوری نیمرخ ماندگی فاز گاز و سرعت محلی فاز مایع در این کار بررسی شد که نتایج حاصل تطبیق مناسبی با داده‌های تجربی را نشان می‌دهد.

چلنبرگ و همکاران [۱] (۲۰۰۵) با شبیه‌سازی راکتور ستون حبابی سه فازی، به بررسی برهم کنش‌های بین فازی (حباب- حباب) و (ذره- ذره)، به خوبی انتقال مقدار حرکت مستقیم بین دو فاز پراکنده ذرات و حباب‌ها، پرداختند. این کار نیز همانند کار فنگ و همکاران، به صورت سه بعدی و در شرایط ناپایا انجام شد. با این تفاوت که در این کار فقط نیروی درگ در معادلات مقدار حرکت لحاظ شد، هم چنین بر خلاف کار قبلی اثر مقادیر حرکت‌های بین فازی برای دو فاز پراکنده در معادلات دیده شد که منجر به بهبود نتایج شبیه‌سازی گردید. تطبیق خوب نتایج شبیه‌سازی با نتایج اندازه‌گیری شده تجربی، شامل جمله‌های ماندگی فازهای گاز، جامد و سرعت فاز مایع در این کار مشاهده شد.

ژانگ و احمدی [۴] (۲۰۰۵) به منظور بررسی ساختار جریان و نحوه تغییرات الگوی جریان با تغییر اندازه حباب‌های گاز در یک راکتور ستون حبابی سه فازی، از آنالیز ردیابی لاگرانژ بهره گرفتند. بعد از کار لی و همکاران [۲۳] (۱۹۹۹) این دومین کاری بود که از مدل (اولرین- لاگرانژین) جهت بررسی هیدرودینامیک جریان در سیستم‌های راکتوری استفاده کردند. شبیه‌سازی به صورت دو بعدی، ناپایا و همراه با لحاظ کردن نیروهای درگ، بویانسی، لیفت و جرم مجازی در معادله مقدار حرکت فاز گسسته انجام شد. در این کار به منظور منفصل‌سازی معادلات فازهای مایع، گاز و جامد به ترتیب از روش‌های تفاضل محدود، اولر و رانج کاتا استفاده شد. همچنین به منظور توصیف برهم کنش‌های (ذره- ذره) و

2. Multiple Reference Frames

1. Lagrangian Trajectory Analysis

جریان مهم باشد، بخصوص در جریان‌های لایه‌ای و لخته‌ای (سیستم‌هایی که یکی از فازهای گاز یا مایع به صورت فاز پراکنده عمل می‌کنند)، استفاده از رویکرد حجم سیال مناسب‌تر و دقیق‌تر است.

۴) دقت شبیه‌سازی‌ها، با در نظر گرفتن پدیده‌های بین‌فازی و اثرات برخورد فازهای پراکنده روی هم افزایش می‌یابد. این امر به خصوص در سیستم‌هایی که برهم‌کنش‌های بین‌فازی زیاد است، مثل راکتورهایی که در آن اختلاط فازها شدید است، حائز اهمیت می‌باشد.

۵) تقریباً تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده، در مقیاس آزمایشگاهی (مقیاس کوچک) صورت گرفته است.

۶) یکی از فاکتورهای مهم در بحث بزرگ‌نمایی^۲، لحاظ کردن تمام پدیده‌های بین‌فازی و اثرات تجهیزات جانبی و تطبیق مناسب و خوب شرایط سیستم مقیاس کوچک با مقیاس صنعتی است. به عبارت دیگر پدیده‌های بین‌فازی در سیستم‌های مختلف از نظر مقیاس متفاوت است، هم‌چنین اثر وجود تجهیزات جانبی مثل همزن، اسپارجر، بافل و تجهیزات جانبی دیگر در ابعاد مختلف، متفاوت می‌باشد. در این‌گونه موارد می‌توان با استفاده از آنالیز ابعادی و تعریف اعداد بی بعد مناسب، درصد خطای موجود در شبیه‌سازی را کاهش داد. به عنوان مثال در یکی از کارهای انجام شده اثرات وجود اسپارجر در سیستم را با تعریف عدد بی بعد اسپارجر لحاظ کردند.

۷) در سیستم‌های دارای بار کم ذرات جامد یا شدت جریان کم فاز گاز، سیستم‌هایی که فاز پراکنده کمتر از ۱۰ درصد حجم راکتور را اشغال می‌کند، مدل فاز گسسته^۳ مناسب است. خصوصاً در مواردی که هدف ردیابی و پایش مسیر ذرات فاز پراکنده (معمولاً ذرات جامد یا حباب‌های گاز) است. مدل اخیر در واقع همان رویکرد (اولرین-لاگرانژین) است.

۸) هنگامی که قرار است رفتار جریان در اطراف یک حباب تنها بررسی شود، باید از مدل حجم سیال استفاده شود. زیرا در این مدل مواردی مثل اثرات گردابه‌های کوچک اطراف حباب‌ها، برهم‌کنش بین حباب‌ها (آمیزش^۴ و شکست^۵) و مسائل مربوط

خصوصیات هیدرودینامیک جریان سه‌فازی شامل بررسی اثرات شدت جریان‌های فازهای گاز و مایع، اثر هندسه و نوع توزیع‌کننده مایع و اثر فشار عملیاتی روی رفتار جریان بود. نتایج حاصل نشان‌دهنده تطبیق خوب نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی می‌باشد.

وانگ و همکاران [۲۷] (۲۰۱۰) به صورت پایا، سه‌بعدی و با استفاده از روش پایه نقطه‌ای^۱ به بررسی رفتار راکتور مخزن همزده سه‌فازی پرداختند. این اولین کاری است که در آن راکتوری شامل فازهای (مایع-جامد-جامد) با تکنیک CFD بررسی می‌شود. هدف این کار پیش‌بینی مدت اختلاط برای تعلیق ذرات جامد در مخزن، بررسی اثرات وجود لوله‌های القایی بر رفتار سیستم و بررسی اثر بر هم‌کنش‌های بین‌فازی و الگوی جریان می‌باشد.

۴- نتیجه‌گیری

به طور کلی در تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده در زمینه راکتورهای سه‌فازی، نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی (داده‌های آزمایشگاهی) تطابق خوبی دارد. شبیه‌سازی‌های انجام شده نشان می‌دهند که به کمک ابزار CFD، به راحتی و بدون هیچ محدودیتی نسبت به روش‌های آزمایشگاهی و تحلیلی، می‌توان انواع مختلف راکتورهای شیمیایی، با تعداد فازهای مختلف، را در حالت‌های مختلف از نظر هندسه سیستم و شرایط عملیاتی و پارامترهای طراحی شبیه‌سازی کرد.

در سیستم‌های سه‌فازی (جامد-مایع-گاز):

۱) هرگاه درصد‌های بار حجمی ذرات جامد و سیال موجود در راکتور به هم نزدیک باشند، می‌توان از مدل شبه‌دوفازی استفاده کرد. که در این مدل، فاز مایع همراه با ذرات جامد به عنوان یک فاز همگن با چگالی و گرانشی مخلوط (جامد-مایع) در نظر گرفته می‌شود.

۲) هر چه قطر ذرات جامد ریزتر و اختلاف چگالی بین فازهای جامد و مایع کمتر باشد، استفاده از مدل شبه‌دوفازی معقول‌تر است. چرا که در این حالت مخلوط دو فاز مایع و جامد همگنی مناسبی دارند و رفتار آنها بسیار نزدیک به رفتار یک مخلوط تک‌فازی است.

۳) هر گاه ماهیت و اثرات نیروهای بین‌فازی بر روی هیدرودینامیک

1. Node Based

2. Scale Up
3. Discrete Phase Model (DPM)
4. Coalescence
5. Breakage

(مایع- مایع- گاز)، (جامد- جامد- مایع) و (جامد- جامد- گاز) می‌باشد که بررسی رفتار جریان در این سیستم‌ها جهت طراحی، عملیات بهینه، عیب‌یابی و کنترل سیستم بسیار مفید و مؤثر خواهد بود. هدف نهایی شبیه‌سازی‌های CFD استفاده از نتایج آن در واحدهای صنعتی می‌باشد. یکی از عمده‌ترین دلایل این امر، نبود اطلاعات آزمایشگاهی و شبیه‌سازی نیمه صنعتی (پابلوت) به منظور طراحی صحیح و بهینه می‌باشد، که خود این مسئله نیز ناشی از هزینه‌های هنگفت مورد نیاز برای شبیه‌سازی‌های معمولاً وقت‌گیر آزمایشگاهی است. لذا باید رویکرد اصلی شبیه‌سازی‌های CFD را به سمت موضوعات و پروژه‌های صنعتی سوق داد.

۵- قدردانی و تشکر

از حمایت مالی شرکت پتروشیمی شهید تندگویان در انجام این مطالعه قدردانی و تشکر می‌شود.

مراجع

- [1] Schallenberg, J., En, J. H., Hempel, D. C., "The important role of local dispersed phase hold-ups for the calculation of three-phase bubble columns" *Chemical Engineering Science* 60, 6027-6033., (2005).
- [۲] قاسمی س، سهرابی م، رحمانی م، "مدل‌سازی ریاضی سنتز فیشر-تروپش در راکتور حبابی دوغابی"، اولین کنفرانس پتروشیمی ایران، ۱۳۸۷.
- [3] Murthy, B. N., Ghadge, R. S., Joshi J. B., "CFD simulations of gas-liquid-solid stirred reactor: Prediction of critical impeller speed for solid suspension", *Chemical Engineering Science* 62, 7184-7195, (2007).
- [4] Zhang, X., Ahmadi, G., "Eulerian-Lagrangian simulations of liquid-gas-solid flows in three-phase slurry reactors", *Chemical Engineering Science* 60, 5089-5104., (2005).
- [5] Behjat, Y., Shahhosseini, S., Hashemabadi, S., H., "CFD modeling of hydrodynamic and heat transfer in fluidized bed reactors", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 35 357-368., (2008).
- [۶] کوئینی د، لونشپیل ا، مترجمان علوی م، حمیدی ع. ا، مهندسی سیال سازی، انتشارات دانشگاه علم و صنعت ایران، (۱۳۷۹).
- [7] Matonis, D., Gidaspow, D., Bahary, M., "CFD simulation of flow and turbulence in a slurry bubble column", *AIChE Journal* 48, 1413-1429, (2002).
- [8] Bahary, M., "Experimental and computational studies of hydrodynamics in three-phase and two-phase fluidized beds", Ph.D. Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago, (1994).

به انتقال جرم و حرارت بین فازی در نظر گرفته می‌شود. (۹) در اکثر شبیه‌سازی‌های انجام شده از مدل اغتشاش ($k-\epsilon$) استاندارد استفاده شده است. از آنجا که در سیستم‌های راکتوری، به خصوص سیستم‌های همزده، رفتار چرخشی مخلوط فازها اهمیت بسیاری پیدا می‌کند، لذا در این گونه موارد استفاده از مدل‌های جامع تر مثل $RNG (k-\epsilon)$ و RSM که اثرات جریانات و گردابه‌های چرخشی را نیز می‌بیند، دقت شبیه‌سازی‌ها را بالا می‌برد. البته لازم به ذکر است که افزایش دقت شبیه‌سازی در این حالات، نیازمند صرف هزینه و زمان بیشتر نیز می‌باشد.

(۱۰) در سیستم‌های سه فازی که سرعت حرکت فازها کم است، می‌توان از لحاظ کردن نیروهای بین فازی در معادلات مقدار حرکت فازها، به جز جمله مربوط به نیروی دراگ، صرف نظر کرد.

(۱۱) در جریان‌های دو فازی (مایع- جامد) و (مایع- گاز)، نیروهای بین فازی به غیر از نیروی دراگ تاثیر چندانی بر روی هیدرودینامیک جریان ندارند.

(۱۲) به طور کلی نیروی جرم مجازی از نیروی دراگ کوچکتر است و زمانی مهم است که فرکانس نوسانات سرعت لغزشی زیاد باشد. از طرف دیگر، به دلیل پیچیدگی فهم مکانیزم اعمال نیروی لیفت از نظر جهت و اندازه در شبیه‌سازی‌های سه بعدی، از لحاظ کردن این نیرو صرف نظر می‌شود. در صورت نیاز فقط در شبیه‌سازی‌های دو بعدی این نیرو وارد معادلات می‌گردد.

همانطور که پیش تر گفته شد، بیشتر مطالعات CFD انجام شده تحت شرایط پایای هندسه دو بعدی انجام گرفته است. اساساً شرایط جریان در این سیستم‌ها به دلیل تلاطمات شدید، برهم کنش‌های بین فازی و پدیده‌های انتقال به صورتی است که نیازمند شبیه‌سازی جریان در هر سه بعد است. زیرا هر سه مولفه محوری، شعاعی و چرخشی در رفتار جریان مؤثر می‌باشند، به خصوص در سیستم‌هایی که به دلیل وجود تجهیزات چرخنده مثل همزن، توربین و دمنده، یک چرخش اجباری در سیستم ایجاد می‌شود. گزارشات موجود حاکی از آنست که اکثر کارهای سه فازی در سیستم‌های (جامد- مایع- گاز) انجام شده است، در صورتی که بسیاری از تجهیزات و واحدهای شیمیایی شامل جریانات (مایع- مایع- جامد)،

- [۹] بزمی م.، تاجریان م.، هاشم آبادی ح.، "شبیه‌سازی عددی جریان دوبعدی حول کاتالیست استوانه ای در راکتورهای بستر قطره‌ای"، یازدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران، (۱۳۸۵).
- [۱۰] نامن ای. بی.، مترجم توفیقی داریان ج.، طراحی راکتورهای شیمیایی، انتشارات دانشگاه تربیت مدرس، تهران، (۱۳۷۲).
- [11] Lopes, R., Quinta, J. G., Ferreira, R., M., "CFD modelling of multiphase flow distribution in trickle beds", *Chemical Engineering Science* 147, 342-355, (2009).
- [۱۲] ی. بهجت، ش. شاه حسینی، س. ح. هاشم آبادی، "شبیه‌سازی CFD ستون حبابی گاز- جامد"، *مجله مهندسی شیمی ایران*، جلد ۵، شماره ۲۶، (۲۰۰۶).
- [13] Bazmi, M., Hashemabadi, S. H., Bayat, M., "CFD Simulation and Experimental Study for Two-Phase Flow through the Trickle Bed Reactors, Sock and Dense Loaded by Trilobe Catalysts", *International Communications in Heat and Mass Transfer* 38, 391–397, (2011).
- [14] Bazmi, M., Hashemabadi, S. H., Bayat, M., "Modification of Ergun Equation for Application in Trickle Bed Reactors Randomly Packed with Trilobe Particles Using CFD Technique", *Korean Journal of Chemical Engineering*, 28(6), 1340-1346, (2011).
- [15] Dehnavi, M. A., Shahhosseini, S., Hashemabadi, S. H., Ghafelebashi, S. M., "CFD Simulation of Hydrodynamics and Heat Transfer in Gas-Phase Ethylene Polymerization Reactors", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 37, 437–442, (2010).
- [16] Behjat, Y., Shahhosseini, S., Hashemabadi, S. H., "CFD modeling of hydrodynamic and heat transfer in fluidized bed reactors", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 35 357–368, (2008).
- [17] Li, Y., Zhang, J., Fan, L. S., "Numerical simulation of gas-liquid-solid fluidization systems using a combined CFD-VOF-DPM method: bubble wake behavior", *Chemical Engineering Science* 54, 5101–5107, (1999).
- [18] Behjat, Y., Dehnavi, M. A., Shahhosseini, S., Hashemabadi, S. H., "Heat Transfer of Polymer Particles in Gas-Phase Polymerization Reactors", *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, Vol. 6, Article A81, (2008).
- [19] Panneerselvam, R., Savithri, Surender S. G. D., "CFD simulation of hydrodynamics of gas-liquid-solid fluidised bed reactor", *Chemical Engineering Science* 64, 1119-1135, (2009).
- [20] Grevskott, S., Sanns, B. H., Dudukovic, M. P., Hjarbo, K. W., Svendsen, H. F., "Liquid circulation, bubble size distributions, and solids movement in two-and three-phase bubble columns", *Chemical Engineering Science* 51, 1703–1713, (1996).
- [21] Mitra-Majumdar, D., Farouk, B., Shah, Y. T., "Hydrodynamic modeling of three-phase flows through a vertical column", *Chemical Engineering Science* 52, 4485–4497, (1997).
- [22] Jianping, W., Shonglin, X., "Local hydrodynamics in a gas-liquid-solid three-phase bubble column reactor", *Chemical Engineering Journal* 70, 81–84, (1998).
- [23] Li, Y., Zhang, J., Fan, L. S., "Numerical simulation of gas-liquid-solid fluidization systems using a combined CFD-VOF-DPM method: bubble wake behavior", *Chemical Engineering Science* 54, 5101–5107, (1999).
- [24] Padial, N. T., Vander Heyden, W. B., Rauenzahn, R. M., Yarbrow, S. L., "Three-dimensional simulation of a three-phase draft-tube bubble column", *Chemical Engineering Science* 55, 3261–3273, (2000).
- [25] Matonis, D., Gidaspow, D., Bahary, M., "CFD simulation of flow and turbulence in a slurry bubble column", *AIChE Journal* 48, 1413–1429, (2002).
- [26] Feng, W., Wen, J., Fan, J., Yuan, Q., Jia, X., Sun, Y., "Local hydrodynamics of gas-liquid-nanoparticles three-phase fluidization", *Chemical Engineering Science* 60, 6887–6898, (2005).
- [27] Wang, L., Zhang, Y., Li, X., Zhang, Y., "Experimental investigation and CFD simulation of liquid-solid-solid dispersion in a stir red reactor", *Chemical Engineering Journal* 65, 5559-5572, (2010).
- [28] Jakobsen, H. A., *Chemical Reactor Modelling*, Springer, Norway, (2008).