

شبیه‌سازی مرحله‌ی فشارزنی یک فرایند جذب سطحی با تناوب فشار با استفاده از روش شبکه بولتزمن دو جزئی

مهدی رحمانی گورتانی* و محمود اشرفی‌زاده
دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۱/۰۷/۲۹ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۱۱/۰۹)

چکیده - در
D3Q27

واژگان کلیدی: روش شبکه بولتزمن، جذب سطحی، مخلوط دوجزئی، فرایند PSA.

Simulation of Pressurization Step of a PSA Process using the Multi-Component Lattice Boltzmann Method

M. Rahmani Gurtani and M. Ashrafizaadeh

Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology

Abstract: The pressurization step of a PSA process has been simulated using the lattice-Boltzmann method. The entropic D3Q27 lattice model for the multi-component oxygen-nitrogen combination of air streaming through a packed bed is proposed and a new boundary condition of oxygen and nitrogen adsorption was applied on the granules surface. The Boltzmann method satisfies both the Navier-Stokes equations and the Stefan-Maxwell diffusion equations. In order to evaluate the adsorption rate, the LDF model with the Langmuir multi-component isotherm were used. To verify the correctness of the presented model, the adsorption rate of each component has been compared with those obtained using the Langmuir isotherm model for single and multi-component test cases. Results confirmed the accuracy of the proposed model.

Keywords: Lattice Boltzmann method, Adsorption, Binary mixture, PSA

*: مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: m_rahmani56@me.iut.ac.ir

c	سرعت شبکه	q*	مقدار جذب در حالت تعادل
D	ضریب دیفیوژن	T	دما
f	تابع توزیع	u	سرعت
f*	تابع توزیع شبه تعادلی	v*	مقیاس تبدیل سرعت
f ^{eq}	تابع توزیع تعادلی	W	ضریب وزنی
g	تابع توزیع کمکی	X	کسر مولی
i	اندیس جهت سرعت شبکه	Y	کسر جرمی
j	اندیس جزء	α	جهت محور مختصات
k	ضریب LDF	μ	ویسکوزیته
L	مقیاس تبدیل طول	ρ	چگالی
m	جرم ملکولی	ρ^*	مقیاس تبدیل واحد چگالی
n	اندیس گام زمانی	τ	زمان آرامش
p	فشار	Δt	گام زمانی
q	مقدار جذب بر واحد جرم	Ω	اپراتور برخورد
q ^s	مقدار جذب در حالت اشباع		

۱- مقدمه

فرایند جذب سطحی با استفاده از تناوب فشار^۱ (PSA)، توسط گورین و اسکاراسترم به ترتیب در سالهای ۱۹۵۷ و ۱۹۶۰ به عنوان یک فرایند جداسازی به ثبت رسید. با وجود این که اسکاراسترم سیکل اصلی PSA را برای خشک کردن هوا طراحی کرده بود، ولی در سالهای بعد، این نوع سیستم برای محدوده‌ی گسترده‌ای از جداسازی‌های مهم صنعتی، از جمله جداسازی هوا (تولید اکسیژن و نیتروژن) مورد استفاده قرار گرفت [۱].

این گونه فرایندهای جداسازی که با استفاده از بسترهای فشرده انجام می‌گیرند، از دو مرحله‌ی اصلی جذب و رهاسازی تشکیل شده‌اند. امروزه با توجه به کاربرد فراوان فرایند PSA در صنایع مختلف، شبیه‌سازی آن به منظور رسیدن

به بازده بالاتر از اهمیت بالایی برخوردار است. از این رو مدل‌های مختلفی برای این منظور ارایه شده است که جزییات متداول‌ترین مدل‌های به کار رفته را در مراجع [۲-۷] می‌توان یافت. وجه اشتراک تمام این شبیه‌سازی‌ها این است که در هیچ کدام از آنها جزییات هندسه و در نتیجه فیزیک جریان مورد بررسی قرار نمی‌گیرد. به عبارتی هندسه یک بستر فشرده با در نظر گرفتن یک ضریب تخلخل در معادلات وارد می‌شود.

در کار حاضر، مرحله‌ی فشارزنی یک سیکل PSA برای تولید اکسیژن از هوا، با در نظر گرفتن جزییات جریان شبیه‌سازی شده است. برای این منظور، جریان هوا (متشکل از ۲۱٪ اکسیژن و ۷۹٪ نیتروژن) در فضای بین دانه‌ها با استفاده

از روش شبکه بولتزمن دوجزبی مدل و مقدار جذب هر جزء به کمک مدل نیروی محرکه خطی^۲ و ایزوترم لانگمویر^۳ دوجزبی محاسبه و به صورت شرط مرزی بر روی مرز دانه‌ها اعمال شده است.

در زمینه شبیه‌سازی فرایند جذب با استفاده از روش شبکه بولتزمن، کارهای متعددی انجام شده است که برای نمونه می‌توان به مراجع [۸-۱۳] اشاره کرد. نکته قابل توجه در مورد این شبیه‌سازی‌ها این است که در همه آنها از این فرض که غلظت جزء جذب شونده به اندازه‌ای کم است که میزان جذب آن تأثیری در هیدرودینامیک سیال ندارد، استفاده شده است. حال آن‌که در بحث جذب اکسیژن یا نیتروژن از هوا چنین فرضی قابل قبول نیست. بنابراین کار حاضر از سایر کارهای انجام شده متمایز است. روش شبکه بولتزمن مورد استفاده در این مقاله، روش انتروپیک پیشنهادی توسط کارلین و همکاران است که به حالت سه‌بعدی توسعه داده شده است [۱۴ و ۱۵]. این مدل علاوه بر این‌که از نظر ترمودینامیکی با قانون دوم ترمودینامیک سازگار است، معادلات ناویر استوکس و معادله پخش استفان ماکسول^۴ را ارضا می‌کند. مطالب ارائه شده در این مقاله به ترتیب زیر است: در بخش دوم نظریه مدل شبکه بولتزمن دو جزیی به طور خلاصه بیان می‌شود، در بخش سوم شرایط مرزی مورد استفاده و چگونگی پیاده‌سازی فرایند جذب توضیح داده می‌شود و در قسمت‌های بعدی نتایج شبیه‌سازی‌های انجام گرفته و جمع‌بندی مطالب ارائه می‌شوند.

۲- مدل دو جزیی روش شبکه بولتزمن

در روش شبکه بولتزمن، معادله بولتزمن در فضای سرعت و به کمک تعداد محدودی بردار سرعت در ساختار شبکه گسسته می‌شود. این شکل گسسته برای یک مخلوط چند جزیی به صورت زیر است [۱۷-۲۰]:

$$\partial_i f_{ji} + c_{ji\alpha} \partial f_{ji} = \Omega_{ji}, \quad j=1, \dots, M \quad i=0, \dots, N \quad (1)$$

که اندیس j بیانگر نوع ذرات، i اندیس سرعت‌های گسسته

شده $\alpha = \{x, y, z\}$ جهت محور مختصات و Ω_{ji} بیانگر جمله برخورد است. در مدل انتروپیک، جمله برخورد به کمک تجزیه سریع - آهسته نزدیک حالت شبه‌تعادلی به صورت زیر تجزیه می‌شود:

$$\Omega_{ji} = -\frac{1}{\tau_{1j}}(f_{ji} - f_{ji}^*) - \frac{1}{\tau_{2j}}(f_{ji} - f_{ji}^{eq}) \quad (2)$$

در معادله (۲) f_{ji}^* و f_{ji}^{eq} به ترتیب توابع توزیع شبه‌تعادلی و تعادلی سیستم و τ_{1j} و τ_{2j} به ترتیب زمان آرامش هر جزء از حالت اولیه به حالت شبه‌تعادلی و از حالت شبه‌تعادلی به حالت تعادلی هستند که برای برقراری قانون دوم ترمودینامیک باید $\tau_{2j} > \tau_{1j}$. چهار ممان اول تابع توزیع، برای هر جزء به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\rho_j = \sum_{i=1}^N f_{ji}, \quad J_{j\alpha} = \sum_{i=1}^N f_{ji} c_{ji\alpha} \quad (3)$$

$P_{j\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N f_{ji} c_{ji\alpha} c_{ji\beta}$, $Q_{j\alpha\beta\gamma} = \sum_{i=1}^N f_{ji} c_{ji\alpha} c_{ji\beta} c_{ji\gamma}$ که ρ_j , $J_{j\alpha}$, $P_{j\alpha\beta}$ و $Q_{j\alpha\beta\gamma}$ به ترتیب چگالی، ممنت، تانسور فشار و ممان مرتبه سوم جزء j ام هستند. برای مدل D3Q27 که در کار حاضر مورد استفاده قرار گرفته است، بردارهای سرعت شبکه و توابع وزنی متناظر با آن‌ها، به صورت زیر هستند:

$$c_{ji} = \begin{cases} (0,0,0) \\ (\pm 1,0,0)c_j, (0,\pm 1,0)c_j, (0,0,\pm 1)c_j \\ (\pm 1,\pm 1,0)c_j, (0,\pm 1,\pm 1)c_j, (\pm 1,0,\pm 1)c_j \\ (\pm 1,\pm 1,\pm 1)c_j \end{cases} \quad (4)$$

$$W_i = \begin{cases} 8/27 & i=0 \\ 2/27 & i=1, \dots, 6 \\ 1/54 & i=7, \dots, 18 \\ 1/216 & i=19, \dots, 26 \end{cases}$$

اندازه سرعت شبکه برای هر جزء، c_j ، به سرعت صوت آن جزء $c_{sj} = \sqrt{RT_0/m_j}$ به صورت $c_j = \sqrt{3}c_{sj}$ مربوط می‌شود که m_j جرم ملکولی جزء j ، R ثابت جهانی گازها و T_0 یک دمای مرجع است.

تابع توزیع تعادلی با مینیمم کردن تابع H ($H = \sum_j \sum_i f_{ji} \ln \frac{f_{ji}}{W_i}$)، تحت قیود بقای چگالی هر جزء و

جدول ۱- پارامترهای مورد نیاز برای محاسبه ضریب دیفیوژن

	O ₂	N ₂
e	۱۰۷/۴	۹۷/۵۳
σ	۳/۴۵۸	۳/۶۲۱

بقای ممتنم مخلوط به صورت زیر به دست می آید:

$$f_{ji}^{eq} = \rho_j W_i \times \prod_{\alpha=1}^d \left(\frac{2c_j - \sqrt{c_j^2 + 3U_\alpha^2}}{c_j} \right) \left(\frac{2u_\alpha - \sqrt{c_j^2 + 3U_\alpha^2}}{c_j - U_\alpha} \right)^{\frac{c_{jia}}{c_j}} \quad (5)$$

که در آن d تعداد ابعاد فضا، $U_\alpha = J_\alpha / \rho$ سرعت مخلوط در جهت α ، و ρ چگالی مخلوط است. توزیع شبه تعادلی سیستم با مینیم کردن تابع H تحت همان قیود قبل و یک قید اضافی که وابسته به پارامترهای تأثیر گذار بر مسئله است، به دست می آید. با توجه به این که دو متغیر مؤثر در انتقال جرم، فشار هر جزء و اختلاف مومنتم اجزاء با مومنتم کلی سیال هستند، هر کدام از این متغیرها را می توان به عنوان متغیر آهسته (قید سوم) در نظر گرفت، که انتخاب هر یک وابسته به شرط $\tau_{2j} > \tau_{1j}$ است. طبیعتاً بر حسب شرایط موضعی جریان می بایست یکی از این دو متغیر به عنوان متغیر آهسته در نظر گرفته شود. در صورتی که اختلاف مومنتم به عنوان متغیر آهسته انتخاب شود، می توان نشان داد توزیع غیر تعادلی هر جزء با جایگذاری سرعت هر جزء $u_j = J_j / \rho_j$ به جای سرعت مخلوط، در معادله (۳) به دست می آید:

$$f_{ji}^*(\rho_j, u_j) = f_{ji}^{eq}(\rho_j, u_j) \quad (6)$$

به کمک بسط چابمن- انسکوک^۵ می توان نشان داد که مدل فوق، معادلات ناویر استوکس و معادله پخش استفان ماکسول را ارضا می کند [۱۸]. در این حالت مقادیر τ_{1j} و τ_{2j} بر حسب خواص اصلی مخلوط (ویسکوزیته و ضریب پخش) به دست می آیند که برای یک سیال دوتایی، در نهایت، این مقادیر عبارت اند از:

$$\tau_{1j} = \tau_{visc,j} = \frac{\mu_{j,eff}}{p}, \quad \tau_{2j} = \tau_{diff,j} = \frac{D\mu_{12}}{X_1 X_2 p} \quad (7)$$

که P فشار کل مخلوط، X کسر مولی جزء مربوطه، D ضریب دیفیوژن، $\mu_{12} = \rho_1 \rho_2 / (\rho_1 + \rho_2)$ جرم کاهش یافته و $\mu_{j,eff}$ ویسکوزیته مؤثر هر جزء است. برای محاسبه ویسکوزیته مؤثر از رابطه وایک با تصحیح بیرد [۲۱]:

$$\mu_{j,eff} = \frac{\mu_j}{\sum_{k=1}^M X_k \phi_{jk}} \quad (8)$$

$$\phi_{jk} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{m_j}{m_k} \right)^{-0.5} \left[1 + \left(\frac{\mu_j}{\mu_k} \right)^{0.5} \left(\frac{m_j}{m_k} \right)^{0.25} \right]^2$$

و برای محاسبه ضریب دیفیوژن از رابطه ارائه شده در [۲۲] استفاده شده است:

$$D = D_{12} = 1.883 \times 10^{-2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{p \sigma_{12}^2 \Omega_D} \quad (9)$$

$$\Omega_D = \left(\frac{T}{e_{12}} \right)^{-0.145} + \left(\frac{T}{e_{12}} + 0.5 \right)^{-2}$$

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}, \quad e_{12} = \sqrt{e_1 e_2}$$

که در آن، P فشار کل مخلوط (پاسکال)، T دما (کلوین)، m_j جرم ملکولی بر حسب گرم بر مول و Ω_D انتگرال برخورد است. ضرایب مورد نیاز برای اکسیژن و نیتروژن در جدول (۱) آمده است. ضریب دیفیوژن به دست آمده از معادله (۹) بر حسب متر مربع بر ثانیه است.

برای بررسی دقیق تر شرط $\tau_{2j} > \tau_{1j}$ ، عدد اشمیت برای هر جزء به صورت زیر تعریف می شود:

$$Sc_j = \frac{\mu_{j,eff}}{\rho D} = \frac{\tau_{1j}}{\tau_{2j}} \frac{Y_1 Y_2}{X_1 X_2} \quad (10)$$

که $Y_j = \rho_j / \rho$ کسر جرمی جزء مربوطه است. با توجه به شرط $\tau_{2j} > \tau_{1j}$ عدد اشمیت در هر نقطه باید در نابرابری زیر صدق کند:

$$Sc_j = \frac{\mu_{j,eff}}{\rho D} \leq \frac{\tau_{1j}}{\tau_{2j}} \frac{Y_1 Y_2}{X_1 X_2} \quad (11)$$

در صورتی که فشار به عنوان متغیر آهسته انتخاب شود می توان نشان داد که $Sc_j \geq Y_1 Y_2 / X_1 X_2$. در این صورت از رابطه دیگری برای تابع شبه تعادلی استفاده می شود [۱۹]. برای

مخلوط اکسیژن و نیتروژن در شبیه‌سازی‌های انجام شده
نابرابری (۱۱) در همه نقاط برقرار بوده است.

برای حل عددی معادله (۱)، آن را با استفاده از روش انتگرال‌گیری
دوزنقه‌ای در زمان به صورت زیر گسسته‌سازی می‌کنند:

$$f_{ji}(x + c_{ji}\delta t, t + \delta t) = f_{ji}(x, t) + \frac{\delta t}{2} \left\{ \Omega_{ji}[f(x, t)] + \Omega_{ji}[f(x + c_{ji}\delta t, t + \delta t)] \right\} \quad (12)$$

که $\Omega_{ji}[f(x, t)]$ انتگرال اپراتور برخورد در زمان t است.
برای تبدیل معادله فوق به یک معادله صریح، تابع کمکی g_{ji}
به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$g_{ji}(x, t) = f_{ji}(x, t) - \frac{\delta t}{2} \Omega_{ji}[f(x, t)] \quad (13)$$

که با جایگذاری در معادله (۱۲) و استفاده از معادله (۲) در
نهایت خواهیم داشت:

$$g_{ji}(x + c_{ji}\delta t, t + \delta t) = f_{ji}(x, t) - \frac{\omega}{\tau_{1j}} [g_{ji}(x, t) - f_{ji}^*(x, t)] - \frac{\omega}{\tau_{2j}} [f_{ji}^{eq}(x, t) - f_{ji}^*(x, t)] \quad (14)$$

معادله فوق مانند روش شبکه بولتزمن معمولی در طی دو
مرحله برخورد و جاری‌شدن حل می‌شود. از آنجاکه معادله
نهایی بر حسب تابع کمکی g_{ji} است، کمیت‌های فیزیکی
جریان به کمک این تابع و به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$\rho_j(f) = \rho_j(g) \quad (15)$$

$$J_{j\alpha}(f) = \frac{J_{j\alpha}(g) + Y_j \left(\frac{\delta t}{2\tau_{2j}} \right) J_{\alpha}(g)}{1 + \delta t / 2\tau_{2j}}$$

$J_{\alpha}(f) = J_{\alpha}(g)$
همان‌طور که گفته شد، در حالت کلی، سرعت شبکه برای
اجزای مختلف یکسان نخواهد بود و لذا طبق معادله
 $c = \delta x / \delta t$ با توجه به این که مقدار گام زمانی برای تمام اجزا
یکسان است، باید از اندازه شبکه متفاوت برای اجزای مختلف
استفاده شود ولی با توجه به این که جرم‌های ملکولی اکسیژن
و نیتروژن به هم‌دیگر نزدیک است در کد تدوین شده برای
کار حاضر، از یک شبکه استفاده شده است.

۳- شرایط مرزی

در تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده، سه نوع شرط مرزی

مورد استفاده قرار گرفته‌اند که در این قسمت توضیح داده
می‌شوند. شرط مرزی کمانه کردن: این شرط مرزی برای تمام
مرزهای جامد غیر از مرز دانه‌ها مورد استفاده قرار گرفته
است.

شرط مرزی فشار ثابت: برای اعمال این شرط مرزی که
برای مرز ورودی مورد استفاده قرار گرفته است، روش ارائه
شده توسط میر [۲۳] به حالت دو جزئی و مدل D3Q27
تعمیم داده شده است. برای این منظور، ابتدا مقادیر مجهول
تابع توزیع (که به طرف داخل دامنه هستند) برای هر جزء، با
استفاده از میانبایی محلی به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$f_{ji}(x, t) = f_{ji}(x + c_{ji}, t) - (f_{jm}(x, t) - f_{jm}(x - c_{jm}, t)), i \in \{\text{incoming links}\} \quad (16)$$

که $c_{jm} = c_{ji} - 2c_{jk}$ و c_{jk} جهت عمود بر مرز و به طرف
داخل دامنه است. سپس با محاسبه چگالی هر جزء به کمک کسر
مولی و فشار کل، این مقادیر به صورت زیر اصلاح می‌شوند:

$$g_{ji} = g_{ji} + W_i \Delta p / W_t, \Delta p = \rho_j - \sum_i g_{ji} \quad (17)$$

$$W_t = 4 \left(\frac{1}{54} + \frac{1}{216} \right), i \in \{\text{incoming links \& } i \neq k\}$$

در نهایت برای اینکه سرعت مماسی روی سطح صفر شود،
اصلاح زیر نیز اعمال می‌شود:

$$g_{ji} = g_{ji} - \frac{1}{W_t} (v - e_k e_k \cdot v) \cdot c_{ji} \quad (18)$$

$$v = \sum_i f_{ji} c_{ji}, W_t = c_j^2 \left(\frac{4}{216} + \frac{2}{54} \right), e_k = \frac{c_{jk}}{c_j}$$

شرط مرزی جذب: این نوع شرط مرزی، برای مرز دانه‌های
جاذب مورد استفاده قرار گرفته است. در این روش، در هر
گام زمانی، ابتدا میزان جذب هر جزء در هر نقطه، به کمک
مدل LDF و ایزوترم لانگمویر محاسبه می‌شود و سپس
مقادیر مجهول تابع توزیع در نقاط مرزی، به کمک میزان
جذب محاسبه شده تعیین می‌شوند. این روش به صورت زیر،
اعمال شده است:

معادله LDF برای جزء j ام به صورت

$$\frac{\partial q_j}{\partial t} = k_j (q_j^* - q_j) \quad (19)$$

جدول ۲ - پارامترهای لانگمویر و ضرایب LDF

	$k [s^{-1}]$	$q^s [mol/kg]$	$b [kPa^{-1}]$
O_2	۰/۱	۲/۸۰۵۰	۰/۰۰۰۵
N_2	۰/۳	۲/۵۲۹۱	۰/۰۰۵۴

است که در آن t زمان، k_j ضریب LDF، q_j تعداد مول جذب شده بر واحد جرم جاذب و q_j^* تعداد مول جذب شده بر واحد جرم جاذب در حالت تعادل با فاز گاز است که با استفاده از ایزوترم لانگمویر دو جزئی از معادله (۲۰) به دست می آید:

$$q_j^* = \frac{q_j^s b_j p_j}{1 + b_1 p_1 + b_2 p_2} \quad (20)$$

که b_1 و b_2 پارامترهای لانگمویر و q_j^s مقدار جذب در حالت اشباع اند، جدول (۲). در صورتی که معادله (۱۹) به صورت ضمنی گسسته شود خواهیم داشت:

$$q_j^n = \frac{q_j^{n-1} - k_j \Delta t q_j^*}{1 - k_j \Delta t} \quad (21)$$

که در این معادله n اندیس مربوط به زمان و Δt اندازه گام زمانی است. بنابراین با توجه به معادله (۲۱) تعداد مول جذب شده بر واحد جرم جاذب در هر گام زمانی مشخص و نرخ آن با توجه به مقدارش در گام زمانی قبل و اندازه گام زمانی قابل محاسبه است. برای محاسبه ی میزان جذب (تعداد مول جذب شده بر واحد زمان) جرم جاذب نیز باید در نظر گرفته شود. برای این منظور، در هر نقطه ی مرزی نسبت تعداد بردارهای مجهول g در آن نقطه به تعداد کل بردارهای مجهول ذره، در جرم ذره ضرب و حاصل آن برای محاسبه ی میزان جذب در نقطه ی مورد نظر، استفاده می شود.

با تعیین میزان جذب در هر نقطه ی مرزی، با توجه به بقای جرم هر جزء، شار جرم ورودی به سطح باید برابر با شار جرم خروجی از سطح به اضافه نرخ جذب باشد به عبارتی:

$$\sum_{i_{in}} f_{ji} c_j - \sum_{i_{out}} f_{ji} c_j = \dot{S}_j \quad (22)$$

در معادله (۲۲) i_{in} بیانگر جهت بردارهای ورودی به نقطه ی مرزی و i_{out} بیانگر جهت بردارهای خروجی از نقطه ی

مرزی یا همان بردارهای مجهول است. برای محاسبه ی مقادیر f_{ji} در جهت های مجهول به معادلات بیشتری نیاز است. در صورتی که ملکول ها زمان کافی برای به تعادل رسیدن با دمای دیوار را داشته باشند، توزیع سرعت به دست آمده ماکسولین خواهد بود و در نتیجه [۲۰]:

$$f_{ji} = \rho_{j,w} f_{ji}^{eq} (\rho=1, U_w) \quad (23)$$

که $\rho_{j,w}$ چگالی جزء مربوطه بر روی دیوار و $f_{ji}^{eq} (\rho=1, U_w)$ تابع توزیع محاسبه شده در چگالی ثابت یک و سرعت دیوار است و از آنجاکه سرعت دیوار برای تمام ذرات صفر است با توجه به معادله (۵) مقدار آن برابر W_i می شود. با حل معادلات (۲۲) و (۲۳) در نهایت مقادیر مجهول f_{ji} به صورت زیر محاسبه می شوند:

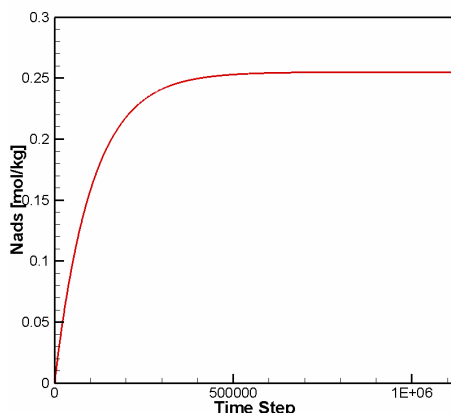
$$f_{ji} = W_i \frac{\sum_{i_{in}} f_{ji} c_j + \dot{S}_j}{\sum_{i_{out}} W_i} \quad (24)$$

با توجه به اینکه مقدار جذب به چگالی (فشار جزئی) اجزا بر روی مرز بستگی دارد ابتدا چگالی در یکی از نقاط سیال مجاور مرز را به عنوان چگالی مرزی در نظر گرفته و میزان جذب را محاسبه می کنیم، در ادامه به کمک معادله (۲۴) مقادیر مجهول f_{ji} و به کمک معادله (۲۳) مقدار چگالی روی مرز را محاسبه می کنیم. سپس با مقدار چگالی به دست آمده این روند را تکرار می کنیم. این تکرار تا وقتی انجام می شود که اختلاف چگالی به دست آمده از معادله (۲۳) با چگالی مورد استفاده برای محاسبه میزان جذب از 10^{-6} کمتر شود. از آنجاکه جذب هر دو جزء مورد نظر است، این روند برای هر دو جزء باید تکرار شود.

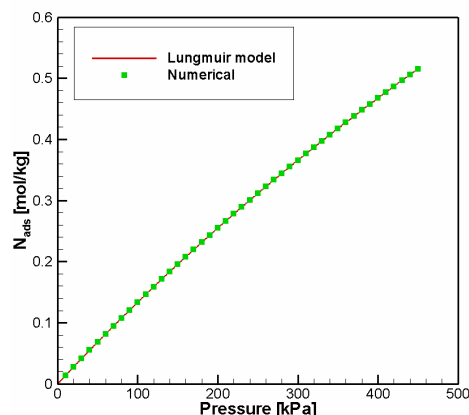
۴- مثال های حل شده

در شبیه سازی های انجام شده، برای تبدیل متغیرهای مسئله به واحد شبکه، از مقیاس های ذیل استفاده شده است. مقیاس طول، از تقسیم طول مشخصه مسئله به طول مشخصه دامنه در واحد شبکه، به دست می آید به عبارتی:

$$L^* = \frac{L}{L_{LB}} \quad (25)$$



شکل ۲- تغییرات جذب اکسیژن بر حسب زمان در فشار ۲۰۰ kPa



شکل ۱- میزان جذب اکسیژن در فشارهای مختلف در مقایسه با حل واقعی

مقدار مرزی در طول شبیه‌سازی استفاده شده است. ابعاد شبکه مورد استفاده در این حالت $120 \times 31 \times 31$ و قطر دانه‌ها $9/33$ در واحد شبکه است. در فشارهای مختلف شبیه‌سازی انجام و مقدار جذب اکسیژن بر واحد جرم جاذب محاسبه شده است. نتایج این شبیه‌سازی‌ها در مقایسه با نمودار لانگمویر در شکل (۱) نشان داده شده است. همان‌طور که انتظار می‌رود این مقادیر کاملاً بر هم منطبق‌اند. شکل (۲) تغییرات تعداد مول جذب شده بر حسب زمان را در فشار 200 kPa نشان می‌دهد. با توجه به این شکل می‌توان گفت، فرایند جذب روند درستی را طی می‌کند.

در حالت دوم جذب نیتروژن خالص مورد قرار گرفته است. برای این منظور کسر مولی اکسیژن 10^{-1} در نظر گرفته شده است. ابعاد مسئله در این حالت با حالت اول برابر است. نمودارهای میزان جذب نیتروژن بر حسب فشار و تغییرات میزان جذب بر حسب زمان در فشار 200 kPa در شکل‌های (۳) و (۴) نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در این حالت نیز نتایج از دقت بالایی برخوردارند. نکته‌ای که در مقایسه شکل‌های (۲) و (۴) باید

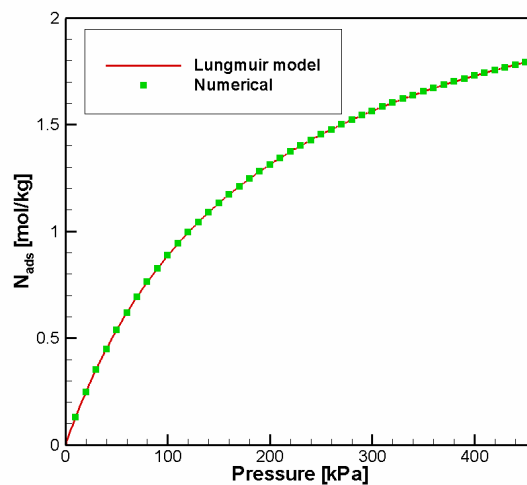
مقیاس سرعت به صورتی انتخاب می‌شود که وقتی سرعت‌ها به واحد شبکه تبدیل می‌شوند، سرعت سبک‌ترین جزء برابر ۱ شود (در نتیجه سرعت بقیه اجزا کمتر از ۱ می‌شود) بنابراین:

$$v^* = \sqrt{3RT_0/m_1} \quad (26)$$

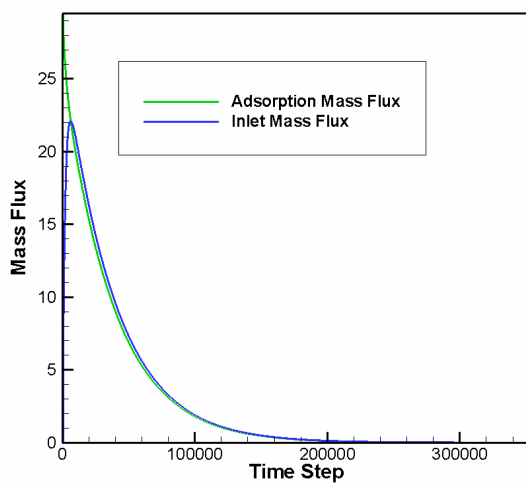
مقیاس چگالی طوری انتخاب می‌شود که چگالی فیزیکی در واحد SI با چگالی در واحد شبکه برابر باشد، یعنی $\rho^* = 1$. مقیاس تبدیل سایر متغیرها از مقیاس‌های فوق به دست می‌آیند.

برای بررسی صحت عملکرد مدل پیاده‌سازی شده، جذب اکسیژن و نیتروژن در یک محفظه استوانه‌ای که شامل ۷۷ دانه جاذب کروی با قطر یکسان است در سه حالت مختلف بررسی شده است. در هر سه حالت خروجی بستر بسته و ورودی آن شرط مرزی فشار ثابت اعمال شده است. شبیه‌سازی‌ها تا زمانی ادامه یافته‌اند که اختلاف نسبی مقدار کل جذب در دو تکرار متوالی از 10^{-6} کمتر شود. مشخصات جاذب مورد نظر، شامل پارامترهای لانگمویر و ضریب LDF در جدول (۲) آمده است.

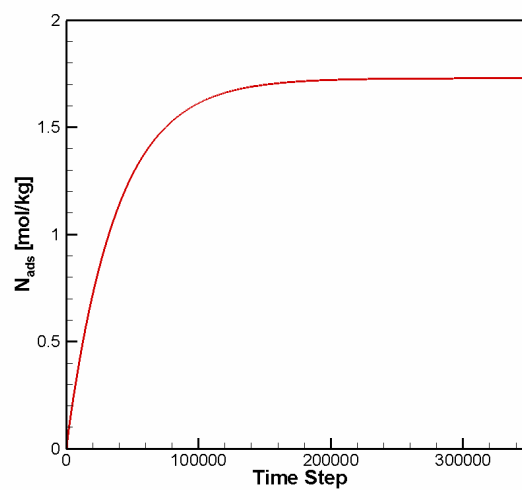
در حالت اول جذب اکسیژن خالص مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور کسر مولی نیتروژن 10^{-1} در نظر گرفته شده است. این کسر مولی برای مقدار دهی اولیه و



شکل ۳- میزان جذب نیتروژن در فشارهای مختلف در مقایسه با حل واقعی



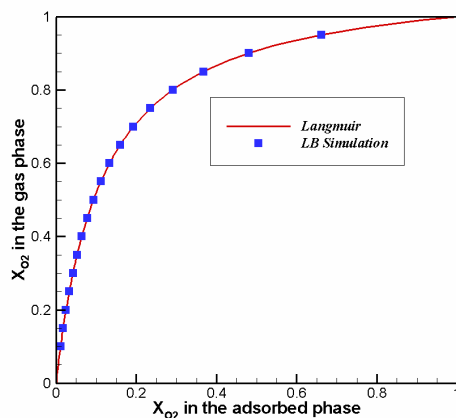
شکل ۵- تغییرات نرخ جذب نیتروژن و نرخ جرم ورودی بر حسب زمان در فشار ۲۰۰ kPa



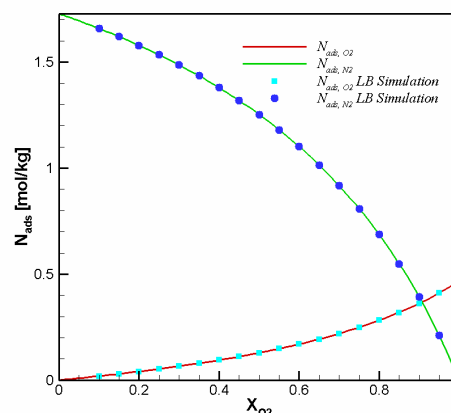
شکل ۴- تغییرات جذب نیتروژن بر حسب زمان در فشار ۲۰۰ kPa

زمان‌های اولیه، این نمودارها بسیار به هم نزدیک‌اند. اختلاف موجود بین این دو نمودار در زمان‌های اولیه ناشی از ماهیت فیزیکی مسئله حل شده است. در حل این مسئله، فشار اولیه در تمام نقاط دامنه حل برابر ۲۰۰ kPa و سرعت اولیه در تمام نقاط برابر صفر در نظر گرفته می‌شود. بنابراین در ابتدای شبیه‌سازی

دقت شود، کمتر بودن زمان رسیدن به حالت اشباع برای نیتروژن است، که این امر به خاطر بزرگتر بودن ضریب LDF برای این جزء است. در شکل (۵) تغییرات دبی جرمی ورودی و نرخ جذب نیتروژن بر حسب زمان برای فشار فوق رسم شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود به غیر از



شکل ۷- کسر مولی اکسیژن در سیال در مقابل
کسر مولی اکسیژن در جاذب در فشار ۴۰۰ kPa

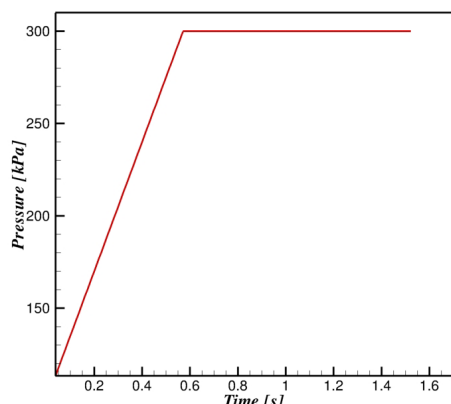


شکل ۶- تعداد مول جذب شده اکسیژن و نیتروژن
در مقابل کسر مولی اکسیژن در فشار ۴۰۰ kPa

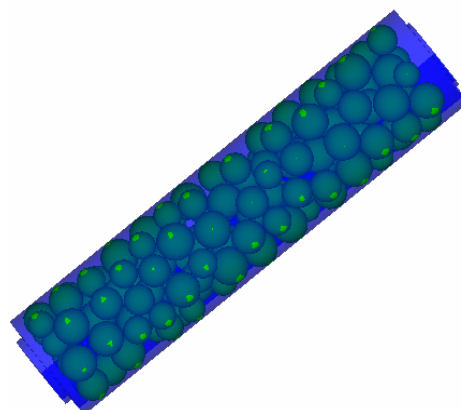
اندازه دانه‌های جاذب کوچکتر انتخاب شده‌اند تا کسر مولی اولیه زیاد تغییر نکنند. ابعاد دامنه حل در این حالت $40 \times 40 \times 120$ و قطر دانه‌ها ۷ واحد شبکه و تعداد آنها ۴۹ است. شکل (۶) تعداد مول جذب شده اکسیژن و نیتروژن در برابر کسر مولی اکسیژن را در مقایسه با حل تحلیلی نشان می‌دهد. کسر مولی متوسط اکسیژن در دامنه حل بر حسب کسر مولی اکسیژن در دانه‌های جاذب در شکل (۷) نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در این حالت نیز نتایج از دقت بالایی برخوردارند.

پس از حصول اطمینان از صحت عملکرد برنامه تدوین شده در شبیه‌سازی فرایند جذب، فرایند جذب در مرحله فشارزنی، در بستر فشرده‌ای با ابعاد $62 \times 62 \times 256$ متشکل از ۱۳۱ دانه جاذب با اندازه‌های مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. هندسه‌ی مورد نظر در شکل (۸) نشان داده شده است. فشار اولیه ۱۰۰ kPa بوده که طی مدت زمان ۰/۶ ثانیه به صورت خطی به مقدار ۳۰۰ kPa رسیده و پس از آن ثابت می‌ماند. این تغییرات فشار به صورت شرط مرزی ورودی اعمال می‌شود. لازم به ذکر است که انتهای بستر در

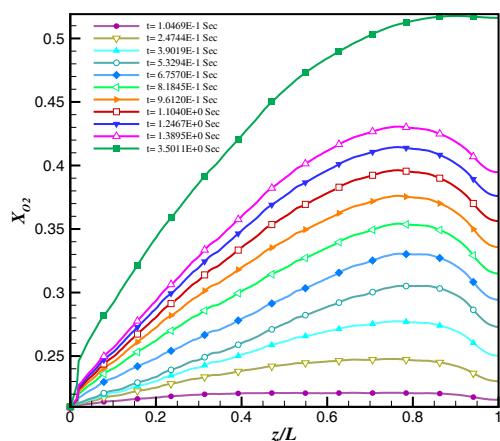
دبی جرمی ورودی برابر صفر است، در حالی که میزان جذب به خاطر این‌که $(q^0 = 0)$ با توجه به معادله (۲۱) بیشترین مقدار خود را داراست. جذب صورت گرفته در روی مرز دانه‌ها باعث کاهش فشار (چگالی) در نقاط اطراف آن‌ها شده و انتقال اثر این کاهش فشار به ورودی (با توجه به ثابت بودن فشار ورودی) باعث ورود جرم به داخل دامنه‌ی حل می‌شود. با گذشت زمان و شکل گرفتن جریان، میزان جرم ورودی برابر با نرخ جذب صورت گرفته روی مرز دانه‌ها می‌شود. اختلاف اندک موجود بین نمودارها، بعد از زمان‌های اولیه، به خاطر خطای محاسبه دبی جرمی ورودی است. ر محاسبه‌ی دبی جرمی، مقطع ورودی مربعی فرض شده است. در حالت سوم میزان جذب اکسیژن و نیتروژن در یک مخلوط دوتایی در فشار ۴۰۰ kPa و کسر مولی‌های مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور، ابتدا یک مقدار اولیه برای کسر مولی در همه نقاط در نظر گرفته می‌شود، در پایان هر گام زمانی، مقدار متوسط کسر مولی در کل دامنه محاسبه و به عنوان مقدار مرزی در گام زمانی بعد مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این حالت دامنه حل بزرگتر و



شکل ۹- تغییرات فشار کل در انتهای بستر مورد نظر

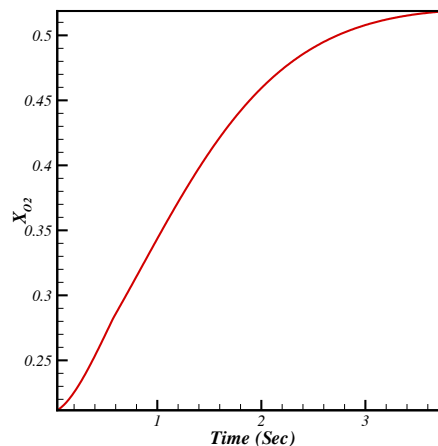


شکل ۸- هندسه‌ی مسئله‌ی حل شده



شکل ۱۱- تغییرات متوسط کسر مولی اکسیژن در طول بستر و در

زمان‌های مختلف



شکل ۱۰- تغییرات کسر مولی اکسیژن بر حسب زمان در

انتهای بستر

به ذکر است که کسر مولی در هر مقطع متوسط گیری شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، به خاطر جذب نیتروژن، با افزایش زمان، کسر مولی اکسیژن در همه جای بستر (به غیر از ورودی که مقدار آن ثابت نگه داشته می‌شود) افزایش می‌یابد. از طرفی، به خاطر جریانی که در بستر ایجاد می‌شود،

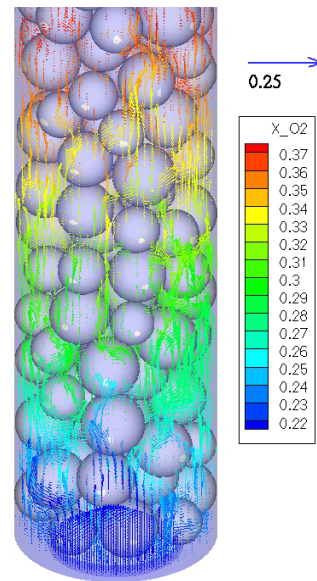
این مرحله بسته است. تغییرات فشار در انتهای بستر، $z=250$ در شکل (۹) نشان داده شده است. شکل (۱۰) تغییرات کسر مولی اکسیژن در این نقطه را در مقابل زمان نشان می‌دهد. همچنین تغییرات کسر مولی اکسیژن در طول بستر در زمان‌های مختلف در شکل (۱۱) نشان داده شده است. لازم

خاطر این که انتهای بستر بسته است، با گذشت زمان به خاطر پدیده پخش ملکولی کسر مولی در مقاطع انتهایی بستر یکسان می شوند.

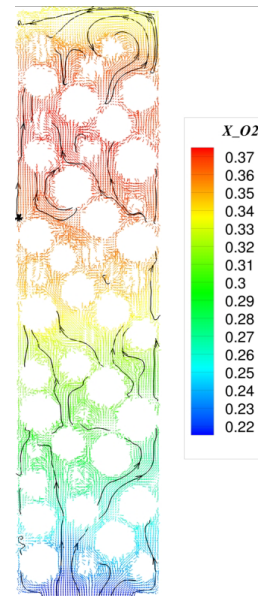
در شکل (۱۲) بردارهای سرعت در حالت سه بعدی برای قسمتی از بستر نشان داده شده است. رنگ بردارها بیانگر کسر مولی اکسیژن در نقطه مورد نظر است. شکل (۱۳) نشان دهنده بردارهای سرعت و خطوط جریان، در صفحه میانی در راستای طول بستر است. برای وضوح بیشتر، تمام بردارها با یک اندازه نشان داده شده اند. بسته بودن انتهای بستر، با توجه به شکل خطوط جریان کاملاً مشخص است. در شکل (۱۴) کانتورهای کسر مولی اکسیژن در صفحات عمود بر راستای طولی محور نشان داده شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می شود، افزایش غلظت اکسیژن از نواحی اطراف دانه ها شروع می شود. همچنین مقدار کسر مولی اکسیژن در هر مقطع یکنواخت نبوده و در راستای شعاع تغییرات وجود دارد. لازم به ذکر است که شکل های (۱۲ تا ۱۴) با توجه به نتایج ثانیه اول شبیه سازی رسم شده اند.

برای بررسی تأثیر اندازه شبکه بر روی نتایج به دست آمده، مسئله مورد نظر با استفاده از شبکه ای با ابعاد $102 \times 102 \times 420$ حل و نتایج آن برای سه زمان مختلف در مقایسه با شبکه قبلی (با ابعاد $62 \times 62 \times 256$) در شکل (۱۵) نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود نتایج حاصل از دو شبکه ریز و درشت اختلاف بسیار کمی با هم دارند (حداکثر ۲ درصد اختلاف) و تنها در شبکه ریزتر، نمودارهای کسر مولی اکسیژن یکنواخت ترند و لذا شبکه انتخاب شده از این نظر مناسب است. لازم به ذکر است که به علت ثابت بودن مقیاس سرعت معادله (۲۶)، با افزایش تعداد نقاط شبکه، مقیاس طول و در نتیجه گام زمانی کاهش یافته و هر دو عامل باعث افزایش زمان حل (هزینه محاسباتی) می شوند.

در مورد چگونگی انتخاب زمان های آرامش در شبیه سازی های انجام شده، لازم به ذکر است که در مدل شبکه

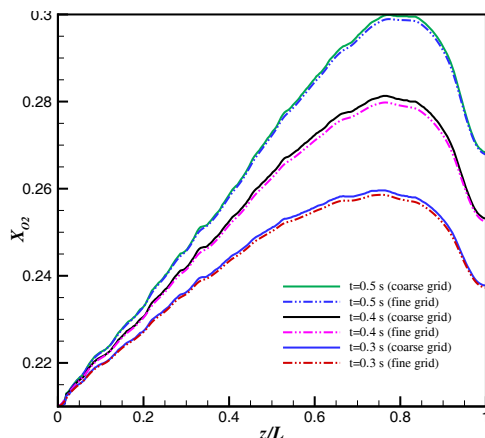


شکل ۱۲- بردارهای سرعت در قسمتی از بستر

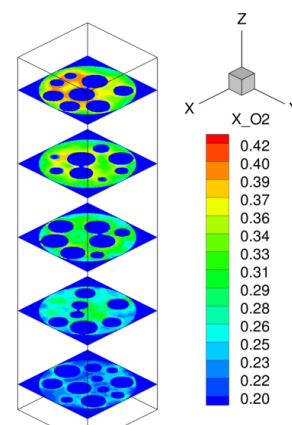


شکل ۱۳- بردارهای سرعت و خطوط جریان در صفحه میانی در راستای طول بستر

غلظت اکسیژن با عبور از روی دانه های جاذب افزایش می یابد به طوری که در مقطعی که آخرین دانه های جاذب قرار دارند، کسر مولی اکسیژن به بیشترین مقدار خود می رسد. هم چنین به



شکل ۱۵- تغییرات کسر مولی اکسیژن در راستای طول
بستر در دو شبکه با ابعاد مختلف



شکل ۱۴- کانترهای کسر مولی اکسیژن در صفحات
عمود بر راستای طول بستر

مرحله فشارزنی یک سیکل اسکاراسترم شبیه‌سازی شده است. برای این منظور جریان دوجزیی اکسیژن و نیتروژن در یک بستر فشرده، با استفاده از روش شبکه بولتزمن انتروپیک، مدل D3Q27، پیاده‌سازی شده و جذب این دو جزء به صورت شرط مرزی، روی مرز دانه‌های جاذب اعمال شده است. با توجه به نتایج حاصل، مدل ارائه شده از دقت بالایی برخوردار است. فرایند جذب اکسیژن و نیتروژن تا کنون به این صورت مورد بررسی قرار نگرفته و مقاله حاضر از این نظر یک کار کاملاً جدید است. شبیه‌سازی یک سیکل کامل فرایند PSA در مقالات بعدی ارائه خواهد شد.

بولتزمن مورد استفاده، مقادیر τ_{1j} و τ_{2j} در هر نقطه، بر حسب خواص اصلی مخلوط (ویسکوزیته، ضریب پخش و فشار) و به کمک معادلات (۷)، (۸) و (۹) به دست می‌آیند به عبارتی این مقادیر جزو ورودی‌های مسئله نبوده و در طول شبیه‌سازی محاسبه می‌شوند. البته خواص مورد نظر (ویسکوزیته، ضریب پخش و ...) باید با استفاده از مقیاس‌های انتخاب شده، بر حسب واحدهای شبکه محاسبه شوند.

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، فرایند جذب سطحی اکسیژن و نیتروژن در

واژه‌نامه

- | | |
|------------------------------------|--------------------------------------|
| 1. pressure swing adsorption (PSA) | 4. Stefan–Maxwell diffusion equation |
| 2. linear driving force (LDF) | 5. Chapman-Enskog expansion |
| 3. Langmuir isotherm | |

مراجع

1. Ruthven, D. M., Farooq, S., and Knaebel, K. S., *Pressure Swing Adsorption*, VCH, New York, 1994.
2. Ruthven, D. M., *Principle of Adsorption and Adsorption Processes*, John Wiley & Sons, New York, 1984.
3. Toth, J., *Adsorption Theory, Modeling, and Analysis*, Marcel Dekker Inc., New York, 2001.
4. Ruthven, D.M., and Farooq S. "Air Separation by pressure Swing Adsorption", *Gas Separation & Purification*, Vol. 4, pp. 141-148, 1990.

5. Adelio, M. M. Mendes, Carlos A.V. Costa, Alirio E. Rodrigues, "Oxygen Separation from Air by PSA: Modeling and Experimental Results Part I: Isothermal Operation", *Separation and Purification Technology*, Vol. 24, pp. 173-188, 2001.
6. Serbezov, A., and Sortirchos, S.V., "Particle-Bed Model for Multicomponent Adsorption-Based Separation: Application to Pressure Swing Adsorption", *Chemical Engineering Science*, Vol. 54, pp. 5647-5666, 1999.
7. Sankararao, B., and Gupta S. K., "Modeling and Simulation of Fixed Bed Adsorbers (FBAs) for Multi-Component Gaseous Separations", *Computer and Chemical Engineering*, Vol. 31, pp. 1282-1295, 2007.
8. Agarwal, S., Verma, N., and Mewes, D., "A Lattice Boltzmann Model for Adsorption Breakthrough", *Heat and Mass Transfer*, Vol. 41, pp. 843-854, 2005.
9. Manjhi, N., and Venma, N., "Lattice Boltzmann Modeling of Unsteady State 2D Concentration Profiles in Adsorption Bed", *Chemical Engineering Science*, Vol. 61, pp. 2510-2521, 2006.
10. Manjhi, N., and Venma, N., "Simulation of 3D Velocity and Concentration Profiles in a Packed Bed Adsorber by Lattice Boltzmann Methods", *Chemical Engineering Science*, Vol. 61, pp. 7754-7765, 2006.
11. Verma, N., Salem, K., and Mewes, D., "Simulation of Micro- and Macro-Transport in Packed Bed of Porous Adsorbents by Lattice Boltzmann Methods", *Chemical Engineering Science*, Vol. 62, pp. 3685-3698, 2007.
12. Verma N., and Mewes D., "Lattice Boltzmann Methods for Simulation of Micro and Macro Transport in a Packed Bed of Porous Adsorbents under Non-Isothermal Condition", *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 58, pp. 1003-1014, 2008.
13. Verma, N. Mewes, D., and Luke A., "Lattice Boltzmann Study of Velocity, Temperature, and Concentration in Micro-Reactors", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 53, pp. 3175-3185, 2010.
14. Karlin, I. V., Ferrante, A., and Ottinger, H.C., "Perfect Entropy Functions of the Lattice Boltzmann Method", *Europhysics Letters*, Vol. 47, No. 2, pp. 182-188, 1999.
15. Karlin, I. V., Chikatamarla, S. S., and Ansumali, S., "Elements of the Lattice Boltzmann Method II: Kinetics and Hydrodynamics in One Dimension", *Communications in Computational Physics*, Vol. 2, No. 2, pp. 196-238, 2007.
16. Gorban, A.N, and Karlin, I. V., "General Approach to Constructing Models of the Boltzmann Equation", *Physica A*, Vol. 206, No. 3-4, pp. 401-420, 1994.
17. Arcidiacono, S., Mantzaras, J., Ansumli, S., Karlin, I., Foruzakis, C., Boulouchos, K.B., "Simulation of Binary Mixtures with the Lattice Boltzmann Method", *Physical Review E*, 74, 056707, pp. 1-9, 2006.
18. Arcidiacono, S., Ansumli, S., Karlin, I. V., Mantzaras, J., and Boulouchos, K. B., "Entropic Lattice Boltzmann Method for Simulation of Binary Mixtures", *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 72 No. 2-6, pp. 79-83, 2006.
19. Arcidiacono, S., Karlin, I. V., Mantzaras, J., and Foruzakis, C., "Lattice Boltzmann Model for the Simulation of Multicomponent Mixtures", *Physical Review E*, Vol. 76, 046730, No. 4, 2007.
20. Arcidiacono, S., Mantzaras, J., and Karlin, I. V., "Lattice Boltzmann Simulation of Catalytic Reactions", *Physical Review E*, Vol. 78, 046711, 2008.
21. Bird, R.B., Stewart, W. E., and Lightfoot, E. N., *Transport Phenomena*, Wiley, New York, 1960.
22. Lawrence, D.C., "A Data Base of Selected Transport Coefficients for Combustion Studies", UCRL-ID-115050, Lawrence Livermore National Laboratory, USA, 1993.
23. Maier R. S., Bernard R. S., and Grunau D. W. "Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann Method", *Physics of Fluids* Vol. 8 No. 7, pp. 1788-1801, 1996.

