



---

**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

Εργαστήριο Ατμοκινητήρων & Λεβήτων

Τομέας Θερμότητας της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών

---

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**«ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙ ΠΡΩΤΗ ΕΦΑΡΜΟΓΗ  
ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΥΠΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ  
ΡΕΥΣΤΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΜΕ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ  
ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΚΑΤΑ LAGRANGE ΜΕ  
ΣΚΟΠΟ ΤΗΝ ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ  
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΚΟΣΤΟΥΣ ΓΙΑ ΤΗ  
ΜΕΛΕΤΗ ΡΕΥΣΤΟΠΟΙΗΜΕΝΩΝ  
ΚΛΙΝΩΝ ΑΝΑΚΥΚΛΟΦΟΡΙΑΣ»**

**Του Φοιτητή**

Μπρίνια Κωνσταντίνου

**Επιβλέπων**

Καρέλλας Σωτήριος, Αναπληρωτής Καθηγητής,  
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, ΕΜΠ

---

Αθήνα, Οκτώβριος 2015



## ΣΥΝΟΨΗ

Στη παρούσα διπλωματική εργασία πραγματοποιείται η τρισδιάστατη προσομοίωση, με εφαρμογή μοντέλων υπολογιστικής ρευστομηχανικής, ενός ενανθρακωτή που αποτελεί ένα από τους δύο αντιδραστήρες μιας πιλοτικής εγκατάστασης συζυγών ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας για τη δέσμευση CO<sub>2</sub>, ισχύος 1 MW<sub>th</sub>. Η ανάπτυξη του αριθμητικού μοντέλου για τη της διφασική ροή εντός των κλινών, γίνεται με εφαρμογή της μεθόδου MP-PIC (Multiphase Particle-In-Cell), η οποία έχει ως βάση την στοχαστική προσέγγιση Euler-Lagrange. Για την ανάπτυξη του μοντέλου χρησιμοποιήθηκε ως βάση το εμπορικό πακέτο ANSYS FLUENT 15.0. Στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας υλοποιήθηκαν κατάλληλοι κώδικες (User Defined Functions) σε γλώσσα C, οι οποίοι ορίζουν σωστά τις οριακές συνθήκες των σωματιδίων και επί της ουσίας πραγματώνουν την ανακυκλοφορία των σωματιδίων, καθώς μοντελοποιήθηκε μόνο ο αγωγός ανόδου της μονάδας. Επίσης στο εμπορικό πακέτο ενσωματώθηκαν κώδικες για την ορθότερη μοντελοποίηση των ενδοσωματιδιακών τάσεων. Όλοι οι κώδικες παραλληλοποιήθηκαν, έτσι ώστε να αξιοποιηθεί η δυνατότητα της υπολογιστικής πλατφόρμας του FLUENT για παράλληλη επεξεργασία.

Παράλληλα, διεξήχθη παραμετρική ανάλυση, στα πλαίσια της οποίας εξετάστηκε η επίδραση του πλήθους των υπολογιστικών σωματιδίων, της κατανομής των σωματιδιακών όρων πηγής μέσω συντελεστών βαρύτητας, καθώς και του συντελεστή αποκατάστασης σωματιδίου-τοιχώματος. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα αποτελέσματα της προσέγγισης Euler-Euler (Zeneli et al., 2015) για την ίδια μονάδα και τις ίδιες συνθήκες λειτουργίας. Τα μοντέλα οπισθέλκουσας που εξετάστηκαν είναι το συμβατικό του Gidasporow και το EMMS, με το δεύτερο να προσεγγίζει ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα, βελτιώνοντας αισθητά την ακρίβεια μοντελοποίησης. Τέλος, επαληθεύτηκε το χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος της μεθόδου σε σχέση με την καθιερωμένη μέθοδο Euler-Euler, καθώς απαιτούνται μόνο 22 ώρες για την προσομοίωση ροής πέντε δευτερολέπτων, με χρήση 4 υπολογιστικών κόμβων. Συνέπεια αυτού, ήταν η μείωση του χρόνου υπολογισμού περίπου κατά 20% σε σύγκριση με τη μέθοδο Euler-Euler. Χρειάζεται όμως περαιτέρω βελτίωση των μοντέλων MP-PIC για να αυξηθεί η ακρίβειά τους τουλάχιστον στο επίπεδο των αποτελεσμάτων της Euler-Euler που έχει διερευνηθεί διεξοδικά πάνω από δύο δεκαετίες.





NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS  
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING  
THERMAL ENGINEERING SECTION  
LABORATORY OF STEAM BOILERS & THERMAL  
PLANTS

DIPLOMA THESIS

**DEVELOPMENT AND FIRST APPLICATION OF A  
LAGRANGIAN BASED (MP-PIC) CFD MODEL FOR  
THE EFFICIENT SIMULATION OF CFBs**

KONSTANTINOS BRINIAS

SUPERVISOR: SOTIRIOS KARELLAS, ASSISTANT PROFESSOR NTUA

ATHENS, SEPTEMBER 2015



## ABSTRACT

This diploma thesis focuses on the 3D CFD simulation of a CFB (Circulating fluidized Bed) pilot-scale carbonator of a 1MW<sub>th</sub> dual fluidized bed installation. The MP-PIC model, based on the stochastic Euler-Lagrange approach, was implemented to simulate the two-phase flow in the CFB. The development of the model was performed in commercial program ANSYS FLUENT 15.0. In-house C-language codes (User Defined Functions) were applied to define properly the particle boundary conditions, modeling essentially particle loop; since only the riser of the installation was modeled. Furthermore, UDFs modeling accurately inter-particle stresses were incorporated as well. Every code was parallelized in order to utilize the capability of Fluent for parallel processing.

In addition, a parametric analysis was conducted, examining the effect of computational particle number, node-based averaging (kernel), as well as wall-particle coefficient of restitution. The simulation results were compared with the simulation results obtained from Euler-Euler approach (Zeneli et al., 2015) for the same unit and identical operational conditions. The homogeneous Gidaspow and EMMS drag models were investigated, as well. The second drag model demonstrates a good agreement with respective experimental data, enhancing significantly simulation accuracy. Finally, the lower computational cost of this method was validated, since only around 22 hours were necessary, utilizing 4 CPUs, for the simulation of a five-second flow; resulting to a 20% reduction in time compared to mature Euler-Euler approach. Yet, further improvement of MP-PIC models is essential to match the accuracy of Euler-Euler approach, which is developed for over two decades.





## **ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ**

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Σ. Καρέλλα, ο οποίος μου έδωσε τη δυνατότητα να επεκτείνω τις γνώσεις μου στο αντικείμενο της υπολογιστικής προσομοίωσης πολυφασικών ροών σε ρευστοποιημένες κλίνες καθώς και να εκπονήσω τη διπλωματική μου εργασία σε συνεργασία με το Εθνικό Κέντρο Έρευνας & Τεχνολογικής Ανάπτυξης (ΕΚΕΤΑ).

Κυρίως όμως θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Δρ. Α. Νικολόπουλο, ο οποίος με βοήθησε σε πολύ μεγάλο βαθμό από τη πρώτη στιγμή ενασχόλησης μου με το αντικείμενο. Η προθυμία του να βοηθήσει σε οποιαδήποτε δυσκολία είχε καθοριστικό ρόλο στην ολόκληρωση της διπλωματικής μου εργασίας και χωρίς τη συμβολή του θα ήταν σχεδόν αδύνατη η εκπόνησή της.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την κ. Μυρτώ Ζενέλη για τη βοήθειά της και την αμέριστη συνεργασία της όλο αυτό τον καιρό.



# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<b>ΣΥΝΟΨΗ.....</b>	<b>iii</b>
<b>ABSTRACT.....</b>	<b>vii</b>
<b>ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ .....</b>	<b>ix</b>
<b>ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ.....</b>	<b>xi</b>
<b>1. Εισαγωγή .....</b>	<b>1</b>
1.1. Ρευστοποίηση και Ρευστοποιημένες κλίνες .....	1
1.2. Πεδία Εφαρμογής – Χαρακτηριστικά Κλινών.....	1
1.2.1. Πεδία Εφαρμογής .....	1
1.2.2. Χαρακτηριστικά Κλινών .....	2
1.3. Δέσμευση Διοξειδίου του Άνθρακα (CO <sub>2</sub> ) μετά την Καύση – Κύκλος CaO/CaCO <sub>3</sub> .....	5
1.4. Φάσεις Ρευστοποίησης – Είδη Ρευστοποιημένης Κλίνης .....	6
1.4.1. Φάσεις Ρευστοποίησης .....	7
1.5. Προέκταση & Εφαρμογή της Εργαστηριακής Γνώσης σε Βιομηχανική Κλίμακα (Scale-up) – Χρησιμότητα CFD .....	8
1.5.1. Scale-up .....	8
1.5.2. Χρησιμότητα CFD.....	10
<b>2. Κύρια Μεγέθη Ρευστοποίησης – Κατηγοριοποίηση Σωματιδίων.....</b>	<b>13</b>
2.1. Κύρια Μεγέθη Ρευστοποίησης .....	13
2.1.1. Διάμετρος Σωματιδίων .....	13
2.1.2. Σφαιρικότητα Σωματιδίων.....	13
2.1.3. Κλάσματα Όγκου.....	13
2.1.4. Πυκνότητες Αέριας και Στερεάς Φάσης.....	14
2.1.4.1. Αέρια Φάση.....	14
2.1.4.2. Στερεά Φάση .....	14
2.1.5. Συντελεστής Αποκατάστασης .....	15
2.1.6. Τερματική Ταχύτητα .....	16
2.1.7. Οπισθέλκουσα Δύναμη.....	17
2.1.7.1. Μοντέλο Gidaspow .....	17
2.1.7.2. Μοντέλο EMMS .....	18
2.2. Κατηγοριοποίηση Σωματιδίων .....	21
<b>3. Τεχνικές Μοντελοποίησης Ροής σε Ρευστοποιημένες Κλίνες – Κινητική Θεωρία Κοκκωδών Ροών (KTFG) .....</b>	<b>23</b>
3.1. Τεχνικές Μοντελοποίησης Ροής σε Ρευστοποιημένες Κλίνες .....	23
3.1.1. Two Fluid Method .....	25
3.1.2. Dense Discrete Phase Model .....	26

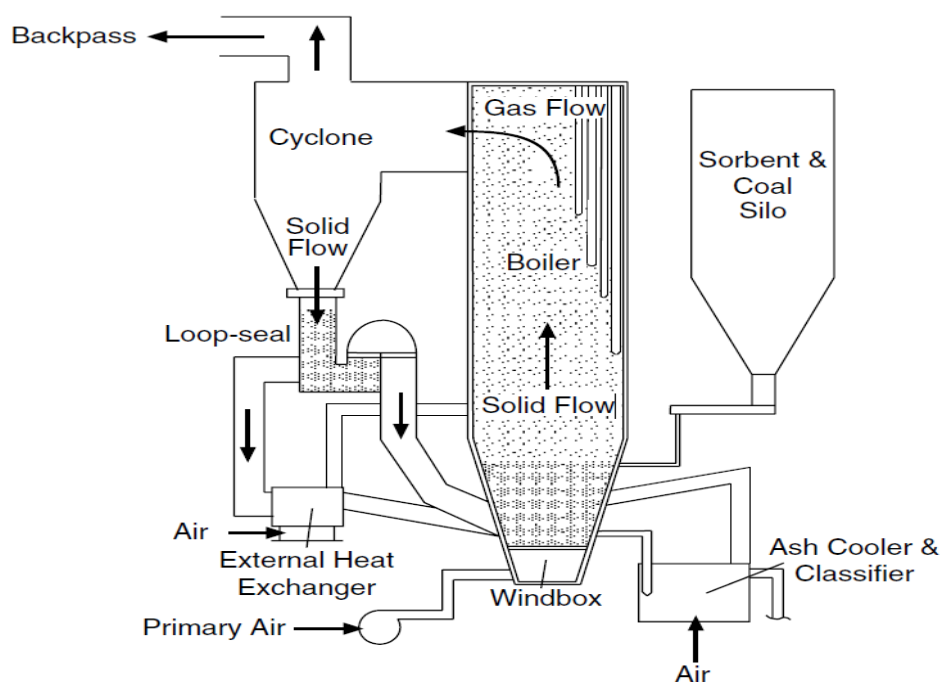
3.1.3. Discrete Element Method .....	27
3.2. Κύρια Στοιχεία της Κινητικής Θεωρίας Κοκκωδών Ροών (KTGF).....	28
<b>4. Αναλυτική Περιγραφή Τεχνικής MP-PIC/DDPM &amp; Παράμετροι</b>	<b>31</b>
4.1. Εισαγωγή – Γεωμετρία .....	31
4.2. Αναλυτική Παρουσίαση Μοντέλου MP-PIC.....	33
4.3. Αρχικοποίηση Στερεάς Φάσης.....	37
4.4. Κατανομή Σωματιδιακών Όρων Πηγής μέσω Συντελεστών Βαρύτητας (Kernel).....	38
4.5. Οριακές Συνθήκες & Παράμετροι .....	39
4.5.1. Μέθοδος Επίλυσης και Διακριτοποίηση .....	39
4.5.2. Χρονικό Βήμα - Αριθμός Courant.....	40
4.5.3. Οριακές Συνθήκες – Ιδιότητες Αέριας και Στερεάς Φάσης.....	41
4.5.4. Πίεση και Θερμοκρασία Λειτουργίας .....	41
4.5.5. Συντελεστές Υποχαλάρωσης (Under-relaxation Factors) .....	42
4.6. Παραδοχές.....	43
<b>5. Παρουσίαση και Διερεύνηση Αποτελεσμάτων .....</b>	<b>45</b>
5.1. Σύγκριση Αποτελεσμάτων TFM, MP-PIC και Μοντέλων Οπισθέλκουσας Δύναμης .....	46
5.2. Παραμετρική Ανάλυση.....	56
5.2.1. Πλήθος Υπολογιστικών Σωματιδίων (Parcel) .....	56
5.2.2. Συντελεστής Βαρύτητας (Kernel).....	61
5.2.3. Συντελεστής Αποκατάστασης Σωματιδίου-Τοιχώματος $e_{sw}$ .....	65
5.2.4. Μοντέλα Κινητικής Θεωρίας Κοκκωδών Ροών (KTGF) .....	69
<b>6. Συμπεράσματα – Μελλοντική Εργασία .....</b>	<b>71</b>
6.1. Συμπεράσματα .....	71
6.2. Μελλοντική Εργασία .....	73
<b>7. Ονοματολογία/Nomenclature .....</b>	<b>75</b>
7.1. Αγγλικοί Συμβολισμοί .....	75
7.2. Ελληνικοί Συμβολισμοί .....	76
7.3. Δείκτες .....	77
7.4. Συντομογραφίες .....	77
<b>8. Βιβλιογραφία .....</b>	<b>79</b>

# 1. Εισαγωγή

## 1.1. Ρευστοποίηση και Ρευστοποιημένες κλίνες

Θεωρούμε ένα στρώμα (bed) στερεών σωματιδίων, τα οποία βρίσκονται σε ηρεμία μέσα σε ένα δοχείο. Η βάση του δοχείου είναι τέτοια ώστε να είναι εφικτή η προσαγωγή ρευστού (υγρού ή αερίου) με ομοιόμορφο διασκορπισμό. Όσο η ταχύτητα του ρευστού παραμένει μικρή, τα σωματίδια παραμένουν ακίνητα και απλά παρατηρείται μία πτώση πίεσης στο ρευστό. Περαιτέρω αύξηση της ταχύτητας συνεπάγεται αύξηση της πτώσης πίεσης και της ασκούμενης από το ρευστό οπισθέλκουσας δύναμης πάνω στα σωματίδια. Από ένα σημείο και ύστερα τα σωματίδια αρχίζουν να κινούνται και να αιωρούνται λόγω του ρευστού. Η διαδικασία μετάβασης ενός στρώματος σωματιδίων από ακίνητο σε αιωρούμενο λέγεται ρευστοποίηση και το εν λόγω στρώμα αποκαλείται ρευστοποιημένη κλίνη (Παπαϊωάννου, 2002b).

Αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής εργασίας αποτελεί η υπολογιστική προσομοίωση με μοντέλα της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) της υδροδυναμικής συμπεριφοράς των ρευστοποιημένων κλινών. Ειδικότερα, διερευνώνται οι ρευστοποιημένες κλίνες με ανακυκλοφορία και εφαρμόζεται η μέθοδος MP-PIC, που αντιμετωπίζει τη στερεά φάση ως διακριτά στοιχεία.



Σχήμα 1.1 Ρευστοποιημένη κλίνη για καύση με ανακυκλοφορία (CFB boiler)

## 1.2. Πεδία Εφαρμογής – Χαρακτηριστικά Κλινών

### 1.2.1. Πεδία Εφαρμογής

Τα πεδία εφαρμογής των ρευστοποιημένων κλινών καλύπτουν ένα πολύ μεγάλο πεδίο εφαρμογών με τα κυριότερα να αφορούν τη παραγωγή ενέργειας, τη πετροχημική

βιομηχανία, την επεξεργασία μεταλλευμάτων, τη χημική και φαρμακευτική βιομηχανία καθώς και διάφορες φυσικές διεργασίες. Ακολουθώντας, παρατίθενται συντόμως κάποιες από τις βασικές εφαρμογές των προαναφερθέντων πεδίων (Basu, 2006):

- α. Παραγωγή Ενέργειας
  - Ατμοπαραγωγή μέσω καύσης
  - Αεριοποίηση Άνθρακα
  - Αποτέφρωση
- β. Πετροχημική Βιομηχανία
  - Χημική Καταλυτική Διάσπαση (FCC)
  - Μέθοδος Fischer – Tropsch (Παραγωγή Syngas)
- γ. Επεξεργασία μεταλλευμάτων
  - Φρύξη (Roasting) Μεταλλευμάτων
  - Αναγωγή (Prereduction) Σιδηρομεταλλευμάτων
  - Καθαρισμός Αλουμινίου εν θερμώ
  - Προ-διάσπαση (Precalcination) του Ασβεστόλιθου στη Βιομηχανία Τσιμέντου
- δ. Χημική και Φαρμακευτική Βιομηχανία
  - Παραγωγή Φθαλικού Ανυδρίτη από Ναφθαλίνη
  - Οξειδωση Βουτανίου σε Μαλεϊκό Ανυδρίτη
  - Μετατροπή Μεθανόλης σε Ολεφίνες
- ε. Φυσικές Διεργασίες
  - Ξήρανση
  - Επίχριση (Coating) Σωματιδίων
  - Μεταφορά Θερμότητας και Δέσμευση Συστατικών Καυσαερίων (Κύκλος  $\text{CaO}/\text{CaCO}_3$ )

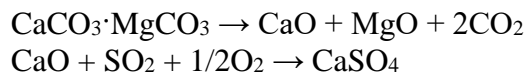
### 1.2.2. Χαρακτηριστικά Κλινών

Όπως έχει ήδη επισημανθεί η χρήση ρευστοποιημένων κλινών στη χημική και πετροχημική (διωλιστήρια πετρελαίου) βιομηχανία βρίσκει εφαρμογής εδώ και πολλές δεκαετίες και έχει καθιερωθεί στα σχετικά πεδία. Ωστόσο, όσον αφορά την παραγωγή ενέργειας από στερεά καύσιμα, είναι μια σχετικά νέα τεχνολογία, η οποία πρέπει να συναγωνιστεί διάφορες τεχνολογίες παραγωγής ενέργειας με πιο διαδεδομένες τις εστίες εσχάρας (Stoker Boiler) και τις εστίες κονιοποιημένου καυσίμου (PC). Για το λόγο αυτό κρίνεται σκόπιμο να γίνει μια σύντομη παρουσίαση των βασικών πλεονεκτημάτων των κλινών έναντι των ανταγωνιστικών τεχνολογιών:

- α. **Ευελιξία Καυσίμου:** Αποτελεί το πλέον σημαντικό γνώρισμα των ρευστοποιημένων κλινών, έναντι των άλλων τεχνολογιών. Οι κλίνες είναι σε θέση να μπορούν να κάψουν ένα πολύ ευρύ φάσμα καυσίμων με μικρές μόνο μεταβολές στην απόδοσή τους. Το εύρος των καυσίμων που δύναται να καούν σε μία κλίνη ενδεικτικά ποικίλουν από άνθρακα και πετρέλαιο σε στερεά απόβλητα ελαιοτριβείου (olive waste), φλοιούς ρυζιού (rice husk) και

κομματιασμένα ελαστικά (shredded tires) (Basu, 2006). Η ευελιξία καυσίμου επιτρέπει να καούν σε κλίνες καύσιμα με μεγάλη περιεκτικότητα σε υγρασία και μάλιστα χωρίς προξήρανση. Εάν παρουσιαστούν φαινόμενα αστάθειας, αυτά μπορούν να αντιμετωπιστούν με την πρόσθετη καύση αερίου ή υγρού καυσίμου (Παπαγεωργίου, 1991). Οι υδροδυναμικές συνθήκες που επικρατούν μέσα σε μία κλίνη πριμοδοτούν την άριστη ανάμιξη αερίων-στερεών και στερεών-στερεών. Κατά συνέπεια, οι κόκκοι καύσιμου, που εισέρχονται στην κλίνη διασκορπίζονται γρήγορα μέσα στην υπάρχουσα μάζα στερεών. Αυτό επιτρέπει την ταχύτερη αύξηση της θερμοκρασίας τους σε επίπεδα άνω της θερμοκρασίας ανάφλεξής τους, ενώ παράλληλα η μεγάλη μάζα αδρανών δεν επιτρέπει τον σχηματισμό ζωνών υψηλής θερμοκρασίας (hot spots) και επιτυγχάνει ομοιόμορφο θερμοκρασιακό πεδίο εντός της κλίνης. Τα ανωτέρω είναι και ο λόγος που η θερμοκρασία λειτουργίας των κλινών βρίσκεται εντός των ορίων 800-900°C. (Basu, 2006) (Παπαϊωάννου, 2002b). Ακόμα είναι ουσιαστικό να σημειωθεί ότι η ευελιξία καυσίμου δίνει τη δυνατότητα εναλλαγής καυσίμου και μετά την κατασκευή της μονάδας (Kakaras et al., 13 March 2009).

- β. **In Situ Αποθείωση:** Σε αντίθεση με τα υπόλοιπα είδη εστιών καύσης στερεών καυσίμων, στις ρευστοποιημένες κλίνες καθίσταται εφικτή η, σε μεγάλο βαθμό, δέσμευση του διοξειδίου του θείου (SO<sub>2</sub>) μέσα στο θάλαμο καύσης. Αυτό γίνεται μέσω της χρήσης ασβεστόλιθου ως αδρανούς υλικού. Η δέσμευση του SO<sub>2</sub> περιγράφεται από την κάτωθι χημική αντίδραση (Κακαράς & Καρέλλας, 2013).



Οι προηγούμενες χημικές αντιδράσεις έχουν τη μέγιστη απόδοσή τους σε θερμοκρασία εντός τους εύρους των θερμοκρασιών λειτουργίας των κλινών.

- γ. **Χαμηλές Εκπομπές Οξειδίων του Αζώτου (NO<sub>x</sub>):** Ένα άλλο πλεονέκτημα που απορρέει από την χαμηλή θερμοκρασία λειτουργίας αφορά τις χαμηλές εκπομπές καθότι η θερμοκρασία εντός της κλίνης είναι πολύ χαμηλή για να οξειδωθεί το άζωτο (N<sub>2</sub>). Για παράδειγμα, μετρήσεις που έγιναν σε βιομηχανικής κλίμακας CFB καύσης δείχνουν εκπομπές στο εύρος 50-150 ppm (Hiltunen & Tang, 1988) η 20-150 mg/MJ (Kullendorff et al., 1988). Ωστόσο πρέπει να τονισθεί ότι οι εκπομπές N<sub>2</sub>O σε CFB είναι πολύ υψηλότερες (15-200 ppm) σε σχέση με αυτές από PC λέβητες, εξαιτίας των πολύ υψηλών θερμοκρασιών που επικρατούν στους τελευταίους (1200-1500°C) και καταστρέφουν αυτό το ρύπο (Nikolopoulos et al., 2014).
- δ. **Υψηλός Βαθμός Απόδοσης Εστίας:** Ο β.α. της εστίας σε μία CFB καύσης κυμαίνεται στο εύρος 97.5-99.5%, ενώ για μία BFB καύσης είναι 90-98%.

Ειδικότερα στη ρευστοποιημένη κλίνη με ανακυκλοφορία είναι υψηλότερη επειδή η ζώνη καύσης φτάνει μέχρι την κορυφή της κλίνης, η οποία μπορεί να φτάσει και έως 60m για βιομηχανικές κλίνες, και συνεχίζεται και στον κυκλώνα, ενώ πολλά από τα άκαυστα παγιδεύονται στον κυκλώνα και επιστρέφουν στην κλίνη. Συνέπεια των προαναφερθέντων είναι να αυξάνεται σημαντικά ο χρόνος παραμονής των σωματιδίων μέσα στην κλίνη και μονάχα ένα πολύ μικρό ποσοστό από αυτά να δραπετεύει από την κλίνη.

Στα προβλήματα των κλινών, που χρήζουν αντιμετώπισης, συγκαταλέγεται η προστασία των επιφανειών συναλλαγής θερμότητας που βρίσκονται εντός της κλίνης. Επιφάνειες που βρίσκονται εντός της κλίνης, και ειδικά στις FFB, είναι αντιμέτωπες με ένα καθεστώς συνεχούς αμμοβολής και υφίστανται σημαντική μηχανική φθορά, λόγω της ροής των σωματιδίων. Γενικά, αποφεύγεται η τοποθέτηση τέτοιων επιφανειών εντός της κλίνης και αυτός είναι ένας από τους λόγους, που ο υπερθερμαντής (superheater) και ο αναθερμαντής (reheater) τοποθετούνται μετά τον κυκλώνα. Εντός της κλίνης, αν έχουν τοποθετηθεί επιφάνειες συναλλαγής, τότε αυτές συνήθως αφορούν εξωτερικό κύκλωμα για την ψύξη - ρύθμιση της θερμοκρασίας – εντός της κλίνης και τοποθετούνται πάντα παράλληλα στον κατακόρυφο άξονα. Η διακίνηση της τέφρας και των αδρανών υλικών αποτελεί ένα ακόμα σημαντικό πρόβλημα με επίδραση στην παραγόμενη ισχύ.

Φάση Ρευστοποίησης	Μόνιμη Κλίνη	Αναβράζουσα Κλίνη	Ταχείας Ρευστοποίησης	Πνευματική Μεταφορά
Εφαρμογή σε Λέβητα	Εσχάρα (Stoker)	Αναβράζουσα Ρευστοποιημένη Κλίνη (BFB)	Ρευστοποιημένη Κλίνη Ανακυκλοφορίας (CFB)	Εστία Κονιοποιημένου Καυσίμου (PC)
Ύψος Κλίνης ή Ζώνης Καύσης (m)	0.2	1-2	10-30	27-45
Ταχύτητα Αέρα στη Ζώνη Καύσης (m/sec)	1-3	0.5-2.5	4-6	15-30
Πυκνότητα Ροής Θερμότητας στο Θάλαμο Καύσης (MW/m <sup>2</sup> )	0.5-1.5	0.5-1.5	3.0-4.5	4-6
Λόγος Ονομαστικού – Ελάχιστου Φορτίου Λειτουργίας	4:1	3:1	3-4:1	3:1
Βαθμός Απόδοσης Εστίας (%)	85-90	90-96	95-99.5	99-99.5
Μέση Διάμετρος Σωματιδίων (mm)	<300	0.03-3	0.05-0.5	0.02-0.08
Ανάμειξη Στερεών Συνολικό ε <sub>g</sub>	Αμελητέα 0.4-0.5	Σχεδόν Τέλεια 0.5-0.85	Σχεδόν Τέλεια 0.85-0.99	Μικρή 0.98-0.998
Κλίση Θερμοκρασίας NO <sub>x</sub> (ppm)	Μεγάλη 400-600	Πολύ Μικρή 300-400	Μικρή 50-200	Σημαντική 400-600
Δέσμευση SO <sub>2</sub> εντός του Θαλάμου Καύσης (%)	-	80-90	80-90	-

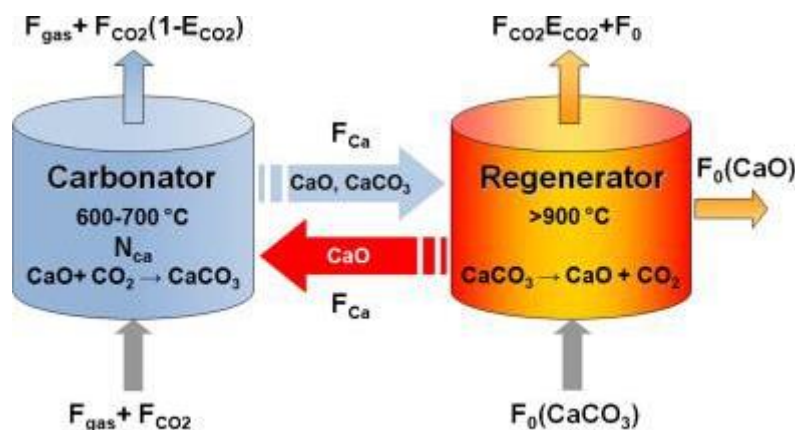
Πίνακας 1-1 Πίνακας Χαρακτηριστικών Ρευστοποιημένων Κλινών και άλλων Εστιών Καύσης Στερεών Καυσίμων (Basu, 2006)



Για μια πληρέστερη εικόνα των προαναφερθέντων παρατίθεται ο Πίνακας 1-1 που παρουσιάζει σημαντικά χαρακτηριστικά των κύριων τεχνολογιών καύσης στερών καυσίμων.

### 1.3. Δέσμευση Διοξειδίου του Άνθρακα (CO<sub>2</sub>) μετά την Καύση – Κύκλος CaO/CaCO<sub>3</sub>

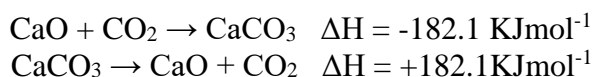
Η δέσμευση του CO<sub>2</sub> και κατ' επέκταση ο περιορισμός των εκπομπών του CO<sub>2</sub> στην ατμόσφαιρα αποτελεί ένα από τους κρίσιμότερους τρόπους αντιμετώπισης της κλιματικής αλλαγής. Το διοξείδιο του άνθρακα ανήκει στα αέρια που προκαλούν το φαινόμενο του θερμοκηπίου και συμβάλλουν στην αύξηση της θερμοκρασίας του πλανήτη. Η καύση ορυκτών καυσίμων είναι ο πιο διαδεδομένος τρόπος για την παραγωγή ενέργειας παγκοσμίως και την κύρια πηγή εκπομπής CO<sub>2</sub>. Τα ανωτέρω, έχουν οδηγήσει σε ένα ιδιαίτερο ενδιαφέρον για την ανάπτυξη τεχνολογιών, οι οποίες θα περιορίζουν τις εκπομπές. Οι τεχνολογίες αυτές χωρίζονται σε δύο κατηγορίες ως προς το στάδιο στο οποίο επιτυγχάνεται η δέσμευση και είναι η δέσμευση πριν και μετά την καύση. Η δεύτερη επιλογή είναι μια ιδιαίτερα ελκυστική μέθοδος, λόγω της δυνατότητας να εφαρμοστεί στις ήδη υπάρχουσες μονάδες παραγωγής χωρίς μεγάλες παρεμβάσεις στις υπάρχουσες εγκαταστάσεις τους. Στις τεχνολογίες αυτές εντάσσονται η υγρή χημική απορρόφηση και η υγρή φυσική απορρόφηση του CO<sub>2</sub>, ο ξηρός διαχωρισμός, η χρήση μεμβρανών και ο κύκλος CaO/CaCO<sub>3</sub> (Κακαράς & Καρέλλας, 2013), ο οποίος και υλοποιείται από την υπό μελέτη μονάδα της παρούσας διπλωματικής εργασίας.



Σχήμα 1.2 Διεργασία Κύκλου CaO/CaCO<sub>3</sub> (Charitos et al., 2010)

Ο κύκλος CaO/CaCO<sub>3</sub> επιτυγχάνεται μέσω των διεργασιών ενανθράκωσης/ ασβεστοποίησης (calcium looping, Σχήμα 1.2) και είναι μια νέα τεχνολογία που δύναται να χρησιμοποιηθεί τόσο σε νέους θερμικούς σταθμούς όσο και στους ήδη υπάρχοντες. Προτάθηκε από τους (Shimizu et al., 1999) και για την πραγματοποίηση του κύκλου χρησιμοποιεί δύο υδροδυναμικά συζευγμένες (συζυγείς κλίνες, DFB) ρευστοποιημένες κλίνες ανακυκλοφορίας (Νικολόπουλος, 2014). Αυτές είναι ο ενανθρακωτής (carbonator), στον οποίο γίνεται εφικτή η δέσμευση του CO<sub>2</sub> λόγω της

πολύ καλής ανάμειξης καυσαερίων – οξειδίου του ασβεστίου (calcium oxide, CaO), και ο ασβεστοποιητής (calciner) στον οποίο γίνεται η αναγέννηση του CaO και η έκλυση του CO<sub>2</sub>, το οποίο πλέον έχει διαχωριστεί από τα υπόλοιπα αέρια συστατικά των καυσαερίων. Για την διάσπαση του CaCO<sub>3</sub> απαιτείται η καύση μίγματος πρόσθετου O<sub>2</sub> – καυσαερίων είτε καθαρού O<sub>2</sub> (Salvador et al., 2003). Το CaO είναι πιο γνωστό με την εμπορική του ονομασία ως άνυδρη άσβεστος ή πιο απλά ασβέστης (quicklime), ενώ ο ασβεστίτης ή ανθρακικό ασβέστιο (calcium carbonate, CaCO<sub>3</sub>) αποτελεί το κύριο συστατικό του ασβεστόλιθου (limestone). Οι αντιδράσεις δέσμευσης του CO<sub>2</sub> και αναγέννησης του CaO παρουσιάζονται κάτωθι:



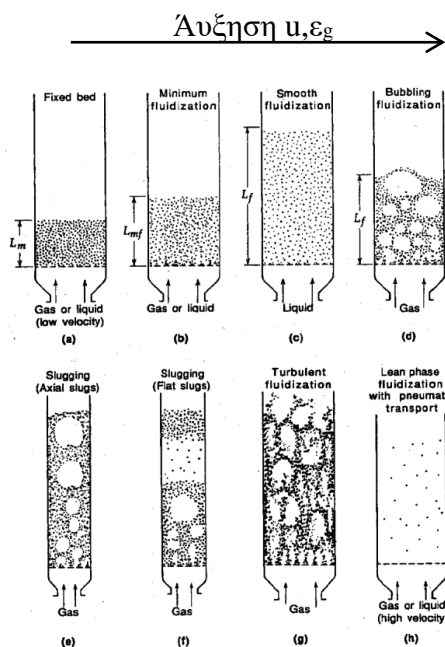
#### 1.4. Φάσεις Ρευστοποίησης – Είδη Ρευστοποιημένης Κλίνης

Στην ενότητα αυτή πραγματοποιείται περιγραφή των διαφορετικών υδροδυναμικών συμπεριφορών, που παρουσιάζουν οι κλίνες ανάλογα με την ταχύτητα του ρευστού που διέρχεται διαμέσου της κλίνης. Η περιγραφή κρίνεται αναγκαία, διότι επιτρέπει την ευκολότερη κατανόηση των φαινομένων που παρατηρούνται στις προσομοιώσεις με μεθόδους υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) της υδροδυναμικής συμπεριφοράς ρευστοποιημένων κλινών. Σε αυτό το στάδιο κρίνεται σκόπιμο να οριστούν κάποιες ταχύτητες, οι οποίες είναι θεμελιώδεις στις κλίνες:

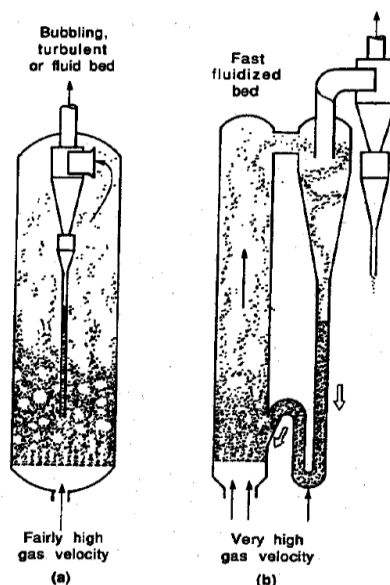
- i. **Φαινόμενη Ταχύτητα U<sub>o</sub>:** Η φαινόμενη ταχύτητα δεν είναι η πραγματική ταχύτητα του ρευστού στην κλίνη, αλλά εκφράζει την ταχύτητα που θα είχε το ρευστό, εάν δεν υπήρχαν σωματίδια στην κλίνη.
- ii. **Ελάχιστη Ταχύτητα Ρευστοποίησης U<sub>mf</sub>:** Η ταχύτητα αυτή είναι φαινόμενη και δηλώνει την ελάχιστη απαιτούμενη ταχύτητα για να αρχίσει η ρευστοποίηση μίας κλίνης.
- iii. **Ελάχιστη Αναβράζουσα Ταχύτητα U<sub>mb</sub> (σε συστήματα αερίου-στερεού):** Η ταχύτητα αυτή είναι επίσης φαινόμενη και δηλώνει την ελάχιστη ταχύτητα κατά την οποία σχηματίζεται η πρώτη φυσαλίδα. Η ταχύτητα αυτή για τις κατηγορίες σωματιδίων B και D [κατηγορίες κατά Geldart (Geldart, 1973) βλ. Κεφάλαιο 2] ταυτίζεται με την U<sub>mf</sub>. Αντίθετα για κόκκους της κατηγορίας A όταν η U<sub>o</sub> ξεπεράσει την U<sub>mf</sub> πραγματοποιείται διόγκωση (expansion) της κλίνης και για U<sub>o</sub>=U<sub>mb</sub>>U<sub>mf</sub> αρχίζει η εμφάνιση φυσαλίδων.
- iv. **Τερματική Ταχύτητα U<sub>t</sub>:** Η ταχύτητα αυτή ορίζεται ως η σχετική ταχύτητα (u<sub>t</sub>=u-u<sub>s</sub>) του ρευστού σε σχέση με ένα σωματίδιο για την οποία η συνισταμένη των δυνάμεων πάνω στο σωματίδιο είναι ίση με μηδέν. Η τιμή της ταχύτητας αυτής εξαρτάται αποκλειστικά από τα φυσικά χαρακτηριστικά του ρευστού και του σωματιδίου (βλ. Κεφάλαιο 2). Η σημασία αυτής της ταχύτητας είναι ιδιαίτερη, καθότι για ταχύτητες μικρότερες αυτής τα σωματίδια παραμένουν εντός της κλίνης, ενώ για μεγαλύτερες παρασύρονται από το ρευστό εκτός της κλίνης.

### 1.4.1. Φάσεις Ρευστοποίησης

Οι διάφορες φάσεις ρευστοποίησης στις κλίνες παρουσιάζονται στο Σχήμα 1.3 διατεταγμένες κατά αύξουσα τιμή φαινόμενης ταχύτητας, ενώ στο Σχήμα 1.4 παρατίθενται δυο ρευστοποιημένες κλίνες με ανακυκλοφορία.



Σχήμα 1.3 Φάσεις Ρευστοποίησης (Kunii & Levenspiel, 1990)



Σχήμα 1.4 Ρευστοποιημένες Κλίνες με Ανακυκλοφορία (Kunii & Levenspiel, 1990)

Για ταχύτητες κοντά στο μηδέν, το ρευστό περνά διαμέσου των κενών χωρίς να επηρεάζει τα σωματίδια, τα οποία παραμένουν ακίνητα (Σχήμα 1.3a). Αυτή είναι η μόνιμη κλίνη (fixed bed). Μικρή αύξηση στην ταχύτητα του ρευστού, οδηγεί σε διόγκωση της κλίνης, ενώ περαιτέρω αύξηση στα επίπεδα της  $u_{mf}$  προκαλεί την έναυση (minimum fluidization) του φαινομένου της ρευστοποίησης (Σχήμα 1.3b). Αύξηση της ταχύτητας σε επίπεδα άνω της ελάχιστης ταχύτητας ρευστοποίησης έχουν σαν συνέπεια την εμφάνιση φυσαλίδων. Αυτό οδηγεί σε ανομοιογενή ρευστοποίηση, που καλείται BFB (Σχήμα 1.3d).

Σημαντικά μεγαλύτερα επίπεδα ταχυτήτων, κοντά στη τερματική ταχύτητα, προκαλούν την εμφάνιση της τυρβώδους (turbulent) ρευστοποιημένης κλίνης (Σχήμα 1.3g). Σ' αυτό το σημείο κρίνεται απαραίτητο να σημειωθεί ότι μέχρι αυτό το σημείο τα σωματίδια παραμένουν εντός της κλίνης, με εξαίρεση κάποια ελάχιστα να διαφεύγουν (Σχήμα 1.4a) και για το λόγο αυτό οι μέχρι τώρα φάσεις αποκαλούνται και φάσεις κατακράτησης (captive stage). Αντίθετα οι φάσεις που λαμβάνουν χώρα σε μεγαλύτερες ταχύτητες και παροχές αποτελούν τις φάσεις μεταφοράς (transport stage), καθότι οι ταχύτητες των σωματιδίων είναι σημαντικά μεγαλύτερες απ τις τερματικές και εγκαταλείπουν την κλίνη (Basu, 2006).

Μετά την τυρβώδη κλίνη ακολουθεί η κλίνη ταχείας ρευστοποίησης (fast fluidization), στην οποία είναι αναγκαία η ύπαρξη κυκλώνα εκτός της κλίνης, για επιστροφή των διαφυγόντων σωματιδίων στη κλίνη (Σχήμα 1.4b). Γύρω από τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας της κλίνης παρατηρείται ροή σωματιδίων, κατά βάση, προς τα πάνω μέσα σε μία αραιή δομή (dilute phase), όπου κυριαρχεί η αέρια φάση. Αντίθετα, περιμετρικά της αραιής δομής, γύρω από τα τοιχώματα, είναι εμφανής η ροή σωματιδίων με κατεύθυνση προς τα κάτω με τη στερεά φάση να κυριαρχεί της αέριας σ' αυτή τη περιοχή (dense phase). Αυτό έχει ως επακόλουθο την δημιουργία ενός ευδιάκριτου «δακτυλίου» (core-annulus) κάθετου στην διατομή της κλίνης. Τέλος, για ακόμα μεγαλύτερες ταχύτητες η ροή γίνεται πολύ αραιή με το αέριο να κυριαρχεί δραματικά σε ολόκληρη την έκταση της κλίνης με συνέπεια την εμφάνιση του φαινομένου της πνευματικής μεταφοράς (pneumatic transport) (Σχήμα 1.3h).

## **1.5. Προέκταση & Εφαρμογή της Εργαστηριακής Γνώσης σε Βιομηχανική Κλίμακα (Scale-up) – Χρησιμότητα CFD**

### **1.5.1. Scale-up**

Η τυπική διαδικασία κατασκευής μιας βιομηχανικής ρευστοποιημένης κλίνης περιλαμβάνει την κατά σειρά δημιουργία μιας κλίνης εργαστηριακών διαστάσεων (laboratory bench scale unit), μιας μεγαλύτερης πιλοτικής μονάδας (pilot plant) και μιας ακόμα μεγαλύτερης μονάδας επίδειξης (demonstration unit). Όλα αυτά τα βήματα λαμβάνουν χώρα πριν την έναρξη κατασκευής της υπό μελέτη μονάδας (full-size commercial unit) (Glicksman, 2003). Κατά της διάρκειας αυτής της διαδικασίας παρατηρούνται σημαντικές αλλαγές στη συμπεριφορά των κλινών διαφορετικού μεγέθους. Αυτό φαίνεται χαρακτηριστικά στην μειωμένη απόδοση του αντιδραστήρα ή του λέβητα.

Η κύρια πρόκληση κατά την διαδικασία μετάβασης από τα όρια του εργαστήριου σε βιομηχανική κλίμακα (scale-up) είναι η σωστή πρόβλεψη των μεταβολών που θα προκύψουν στη συμπεριφορά της κλίνης ώστε να βελτιστοποιηθεί η λειτουργία της κλίνης. Τα βασικά στοιχεία αυτής της διαδικασίας περιλαμβάνουν την κατανόηση των υδροδυναμικών αλλαγών που λαμβάνουν χώρα καθώς και με ποιο τρόπο επιδρούν στους ρυθμούς αντίδρασης και στον μηχανισμό μετάδοσης θερμότητας μέσα από τις μεταβολές στην κατανομή του αερίου, την επαφή αερίου-στερεών, το χρόνο παραμονής και την ανακυκλοφορία των σωματιδίων (Glicksman, 2003).

Η συχνή αδυναμία κατασκευής θερμών αντιδρώντων κλινών έχει οδηγήσει στην εκτεταμένη χρήση ισοθερμοκρασιακών μοντέλων (cold models). Αυτά παρότι δεν μπορούν να προσομοιώσουν με ακρίβεια τις πραγματικές συνθήκες λειτουργίας, είναι σε θέση ωστόσο να προσομοιώσουν την υδροδυναμική συμπεριφορά, η οποία είναι άκρως εξαρτώμενη από το μέγεθος της κλίνης. Κατά τη διαδικασία κατασκευής μεγαλύτερων κλινών η κύρια παράμετρος που συμβάλει στις παρατηρούμενες αλλαγές είναι η διάμετρος της κλίνης. Το κύριο χαρακτηριστικό είναι ότι με την αύξηση της διαμέτρου δημιουργούνται δυσμενείς, για την υλοποίηση χημικών αντιδράσεων, συνθήκες. Αυτό είναι εξαιρετικά εμφανές στις BFB, όπου η εμφάνιση

μεγάλων φυσαλίδων επιτρέπει στο αέριο να παρακάμπτει τα σωματίδια και μ' αυτό τον τρόπο να μην γίνεται σωστή ανάμειξη των δύο φάσεων. Όπως αναφέρθηκε ήδη πιο πάνω, η δυνατότητα σωστής υπό κλίμακα μοντελοποίησης της συναγωγής θερμότητας είναι δύσκολη, η δε μοντελοποίηση χημικών αντιδράσεων ή υδρομηχανικών φαινομένων, όπως είναι η διάβρωση, παραμένουν προς το παρόν αδύνατες (Glicksman, 2003).

Ένα άλλο βασικό πρόβλημα που χαρακτηρίζει το scale-up είναι η αδυναμία λήψης πειραματικών μετρήσεων από το εσωτερικό μεγάλων κλινών, με αυτές να περιορίζονται σε περιοχές κοντά στα τοιχώματα (Grace et al., 2003). Ειδικά, για τις CFB υφίσταται άλλο ένα σοβαρότατο πρόβλημα που αφορά τις δυσκολίες μετρήσεων ακριβείας του ρυθμού ανακυκλοφορίας των σωματιδίων ανά μονάδα επιφανείας Gs.

Τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της υδροδυναμικής συμπεριφοράς των κλινών μπορούν να ταξινομηθούν σε τρεις τύπους:

- i. **Εμπειρικά Μοντέλα (Empirical Correlations):** Είναι σε μεγάλο βαθμό διαδεδομένα εξαιτίας των πολύπλοκων φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στις πολυφασικές ροές. Το κύριο αρνητικό πρόβλημα, που συνοδεύει αυτά τα μοντέλα, είναι η δυνατότητα εφαρμογής τους σε πολύ περιορισμένες συνθήκες λειτουργίας, λόγω του μεγάλου αριθμού μεταβλητών που εμπλέκονται και των περιορισμένων, εκ' των πραγμάτων, πειραματικών μετρήσεων για κάθε μεταβλητή (Grace et al., 2003).
- ii. **Ημιεμπειρικά Μοντέλα (Mechanistic Models):** Προτιμώνται κατά βάση έναντι των εμπειρικών και αποτελούν συνδυασμούς θεωρητικών σχέσεων, στις οποίες έχουν απαλειφθεί οι λιγότερο σημαντικοί όροι, με πειραματικά αποτελέσματα. Τα κύρια προβλήματα, που αντιμετωπίζουν, αφορούν την συχνή αδυναμία των οριακών συνθηκών στη βάση της κλίνης καθώς και την υπόθεση αξονικής συμμετρίας και σιγμοειδούς<sup>1</sup> προφίλ (sigmoidal voidage profile) για το κλάσμα όγκου των σωματιδίων ή τέλειας δακτυλιοειδούς ροής (perfect core-annular flow) (Grace et al., 2003).
- iii. **Μοντέλα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (CFD Models):** Τα μοντέλα αυτά χρησιμοποιούνται εκτεταμένα τα τελευταία χρόνια εξαιτίας της δραματικής αύξησης της υπολογιστικής ισχύος των σημερινών επεξεργαστών και ιδιαίτερα λόγω της δυνατότητας χρήσης πολλών επεξεργαστών ταυτόχρονα (παράλληλη επεξεργασία). Οι αδυναμίες, που εμφανίζουν προς το παρόν είναι κυρίως υπερβολικό υπολογιστικό κόστος και το γεγονός ότι δεν έχουν αναπτυχθεί σε βαθμό που να μπορούν να μοντελοποιήσουν όλες τις πτυχές λειτουργίας μιας κλίνης (χημικές αντιδράσεις, κατανομή σωματιδίων).

---

<sup>1</sup> Ο έχων σχήμα S

Οι δύο πρώτοι τύποι μοντέλων είναι αλληλένδετα συνδεδεμένοι με τη διεξαγωγή πειραμάτων, καθώς οι πειραματικές μετρήσεις είναι αναγκαίες για την θεμελίωση των μοντέλων αυτών. Για την εξαγωγή σωστών συμπερασμάτων είναι αναγκαία συνθήκη η ισχύς της αρχής της ομοιότητας μεταξύ των κλινών. Η ύπαρξη πλήρους ομοιότητας απαιτεί την ύπαρξη τριών επιμέρους ομοιοτήτων, μ' αυτές να είναι η γεωμετρική (ίδιο σχήμα & ίδιος παράγοντας κλίμακας διαστάσεων), η κινηματική (ίδια κατεύθυνση ταχυτήτων & ίδιος παράγοντας κλίμακας ταχυτήτων) και η δυναμική (παράλληλες δυνάμεις & ίδιος παράγοντας κλίμακας δυνάμεων) (Παπαϊωάννου, 2002a).

Η εύρεση σωματιδίων, για τα οποία να ισχύουν όλες οι σχέσεις ομοιότητας δεν είναι πάντα εύκολη και κάποιες φορές ακόμα και αδύνατη. Ακόμα και για ειδικές περιπτώσεις ( $Re_p < 4$  &  $Re_p > 1000$ ), όπου ο αριθμός των αδιάστατων ομάδων, που πρέπει να παραμένουν αμετάβλητες, μειώνεται η διαδικασία παραμένει αρκετά απαιτητική. Από την άλλη πλευρά η απλοποίηση που εφαρμόζεται αρκετά συχνά και λαμβάνονται υπόψη λιγότερες αδιάστατες ομάδες οδηγεί συχνά σε μη ακριβή δεδομένα. Τέλος, είναι αναγκαίο να σημειωθεί ότι ακόμα και στην περίπτωση της πλήρους ομοιότητας παράμετροι όπως, το σχήμα των σωματιδίων, το PSD, οι κρούσεις μεταξύ σωματιδίων και σωματιδίων-τοιχωμάτων κ.α. δεν λαμβάνονται υπόψη, οδηγώντας μερικές φορές σε απογοητευτικά αποτελέσματα (Glicksman et al., 1991).

### 1.5.2. Χρησιμότητα CFD

Η διαδικασία κατασκευής μοντέλων διαφορετικής κλίμακας, με μέγεθος από εργαστηριακό μέχρι πιλοτικές μονάδες, πέραν του μεγάλου κόστους που απαιτεί είναι εξαιρετικά χρονοβόρα, ενώ συχνά οδηγεί σε πτωχά αποτελέσματα λόγω των απλουστεύσεων και υποθέσεων που πρέπει να γίνουν στην πορεία. Όλα τα παραπάνω προβλήματα συνηγορούν στην αναγκαιότητα χρήσης των μοντέλων της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, η οποία δεν είναι άμεσα εξαρτώμενη από πειραματικές μετρήσεις.

Τα παραπάνω έχουν οδηγήσει σε έντονο ενδιαφέρον, τόσο της ακαδημαϊκής κοινότητας όσο και των εταιριών-κατασκευαστών ρευστοποιημένων κλινών, για την ανάπτυξη μοντέλων που μειώνουν την εξάρτηση της υδροδυναμικής προσομοίωσης από το χρησιμοποιούμενο πλέγμα. Η οπισθέλκουσα μεταξύ των δύο φάσεων είναι κρίσιμη παράμετρος και αποτελεί έναν από τους πιο καθοριστικούς παράγοντες που επιδρούν στην υδροδυναμική συμπεριφορά των CFB. Τα συμβατικά μοντέλα οπισθέλκουσας υιοθετούν την υπόθεση του ομοιόμορφου διασκορπισμού των σωματιδίων και δεν είναι σε θέση να περιγράψουν την δημιουργία των συμπλεγμάτων. Η οργάνωση σε συμπλέγματα (clusters) έχει ως αποτέλεσμα την σημαντική μείωση της οπισθέλκουσας και κατά συνέπεια την υπερεκτίμησή της από τα συμβατικά μοντέλα (Zhang et al., 2011). Ως εκ' τούτου, προκύπτουν ανακριβή αποτελέσματα, ενώ μία πραγματικά ακριβής και πλεγματικά ανεξάρτητη λύση μπορεί να προκύψει μονάχα για πολύ πυκνά πλέγματα, τα οποία όμως μπορούν να έχουν μόνο θεωρητικό και όχι τεχνολογικό ενδιαφέρον.

Στις CFB παρατηρούνται τρεις χαρακτηριστικές κλίμακες μήκους που επιβάλλουν τη χρήση πολύ πυκνών πλεγμάτων. Αυτές αποτελούνται από την μικρο-κλίμακα (μέση ελεύθερη διαδρομή σωματιδίων), την μεσο-κλίμακα (μέση διάμετρος σωματιδίων) και μακρο-κλίμακα (ύψος ή διάμετρος κλίνης). Η ανάγκη για πολύ πυκνά πλέγματα, μπορεί μόνο να αντισταθμιστεί με την ανάπτυξη υποπλεγματικών μοντέλων, τα οποία θα είναι σε θέση να δίνουν ακριβή αποτελέσματα για αραιά πλέγματα. Σημαντικά βήματα για την επίτευξη πλεγματικής ανεξαρτησίας σε αραιά πλέγματα έχουν γίνει με την ανάπτυξη του μοντέλου οπισθέλκουσας EMMS (Lu et al., 2009). Το μοντέλο αυτό λαμβάνει υπόψη το σχηματισμό και τη διάλυση των clusters που έχουν καταλυτικό ρόλο στα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα (Νικολόπουλος, 2014), ωστόσο απαιτείται ακόμα αρκετή έρευνα για την, σε βάθος, κατανόηση αυτών των φαινομένων και την δυνατότητα μαθηματικής τους θεμελίωσης.

Η πλέον ανεπτυγμένη και ώριμη μέθοδος με εφαρμογή στις πολυφασικές ροές είναι η TFM (Two Fluid Method), η οποία αντιμετωπίζει τη στερεά φάση ως ένα συνεχές μέσο με πολύ μεγάλη πυκνότητα. Αναφορικά, με το υψηλό υπολογιστικό κόστος, ιδιαίτερα υποσχόμενη μέθοδος είναι η MP-PIC (Andrews & O'Rourke, 1996), η οποία αντιμετωπίζει τη στερεά φάση ως διακριτή και υπολογίζει τις κρούσεις μεταξύ των σωματιδίων έμμεσα. Η μέθοδος αυτή είναι κατάλληλη για εφαρμογή σε υβριδικά συστήματα CPU-GPU (Li et al., 2012), τα οποία έχουν τη δυνατότητα να μειώσουν δραματικά το χρόνο επίλυσης της ροής και κατά συνέπεια το υπολογιστικό κόστος. Ωστόσο, η μέθοδος αυτή απαιτεί την ανάπτυξη εξελιγμένων μοντέλων σχετικά με τις ενδοσωματιακές κρούσεις (Zeneli et al., 2014).

Ο κεντρικός ρόλος που αναμένεται να παίζει η υπολογιστική ρευστοδυναμική στη κλίνες και γενικότερα στις εφαρμογές που εμπλέκονται πολυφασικές ροές ρευστών-στερεών φαίνεται και από την ανάπτυξη εμπορικών πακέτων, π.χ. Barracuda (CPFD Software LLC, n.d.) με αντικείμενο την επίλυση τέτοιων ροών.

Τέλος, οι προσομοιώσεις CFD μπορούν να προσφέρουν σημαντικά στην βελτιστοποίηση (optimization) των ρευστοποιημένων. Ακριβείς προσομοιώσεις μπορούν να εντοπίσουν περιοχές όπου ανακύπτουν προβλήματα, όπως χαμηλοί ρυθμοί αντίδρασης και να προσφέρουν λύσεις διαμέσου ενδεδειγμένης παραμετρικής διερεύνησης χωρίς τα υψηλά κόστη που απαιτεί η κατασκευή πιλοτικών μονάδων (Nikolopoulos et al., 2010b).





## 2. Κύρια Μεγέθη Ρευστοποίησης – Κατηγοριοποίηση Σωματιδίων

### 2.1. Κύρια Μεγέθη Ρευστοποίησης

#### 2.1.1. Διάμετρος Σωματιδίων

Τα σωματίδια μίας κλίνης και οποιασδήποτε άλλης διάταξης περιλαμβάνει στερεούς κόκκους δεν είναι δυνατό να έχουν όλα την ίδια διάμετρο αλλά ακολουθούν μία κατανομή. Η ύπαρξη κατανομής διαμέτρων δημιουργεί την ανάγκη διαχωρισμού των διαμέτρων σε διαστήματα καθώς και του ποσοστού των σωματιδίων που ανήκουν σε κάθε διαστήματα. Η πιο συνηθισμένη τεχνική (sieve analysis) περιλαμβάνει την χρήση ειδικής εργαστηριακής συσκευής, η οποία περιλαμβάνει διαδοχικά κόσκινα. τα οποία και κατακρατούν σωματίδια διαφορετικού μεγέθους. Τα κόσκινα αυτά διατάσσονται με βάση το μέγεθος των οπών τους με φθίνουσα σειρά. Το κάθε κόσκινο κατακρατεί σωματίδια διαφορετικού μεγέθους και έτσι προκύπτει μία διακριτή κατανομή σωματιδίων (PSD). Μετά την διαδικασία αυτή ζυγίζονται τα σωματίδια που κατακρατήθηκαν σε κάθε κόσκινο (Yang, 2003). Αυτό επιτρέπει την εύρεση μίας μέσης διαμέτρου, η οποία μπορεί να αντιπροσωπεύσει την κατανομή και δίνεται από την εξής σχέση:

$$d_p = \frac{1}{\sum \frac{x_i}{d_i}}, \text{ όπου} \quad (2.1)$$

Η διάμετρος  $d_p$  καλείται μέση διάμετρος Sauter και το χαρακτηριστικό της είναι ότι αντιστοιχίζεται με το λόγο επιφάνειας/όγκου της κατανομής.

#### 2.1.2. Σφαιρικότητα Σωματιδίων

Η σφαιρικότητα (sphericity) των σωματιδίων ορίζεται ως (Wadell, 1933):

$$\varphi = \frac{\text{επιφάνεια σφαίρας ισοδύναμου όγκου}}{\text{επιφάνεια σωματιδίου}} \quad (2.2)$$

Για σφαιρικά σωματίδια είναι  $\varphi = 1$ , ενώ για τα μη σφαιρικά ισχύει  $0 < \varphi < 1$ .

#### 2.1.3. Κλάσματα Όγκου

Σε μία διφασική (αέριο-στερεό) ροή, το κλάσμα κενού (voidage) ή κλάσμα όγκου της αέριας φάσης (gas volume fraction) σε ένα όγκο ορίζεται ως ο όγκος που καταλαμβάνει το αέριο προς τον συνολικό όγκο και δίνεται από την εξής σχέση:

$$\varepsilon_g = \frac{V_g}{V_{cell}} \quad (2.3)$$

Κατά αναλογία ορίζεται και το κλάσμα όγκου της στερεάς φάσης (solid volume fraction) και δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\varepsilon_s = \frac{V_s}{V_{cell}} \quad (2.4)$$

Τα δύο κλάσματα συνδέονται με τη σχέση  $\varepsilon_g + \varepsilon_s = 1$ .

Το μέγιστο κλάσμα όγκου της στερεάς φάσης (packing limit,  $\varepsilon_{s,max}$ ) αποτελεί χαρακτηριστική ιδιότητα των κόκκων και είναι, γενικά, περίπου ίσο με 0.63 για σωματίδια ίδιας διαμέτρου. Εξαρτάται από την διάμετρο των σωματιδίων, και παρατηρείται αύξηση της τιμής του στη περίπτωση κατανομής σωματιδίων (PSD), καθώς τα μικρότερα σωματίδια καταλαμβάνουν χώρους ανάμεσα στα μεγαλύτερα σωματίδια.

#### 2.1.4. Πυκνότητες Αέριας και Στερεάς Φάσης

Κρίνεται σκόπιμο να γίνει διάκριση των διαφορετικών πυκνοτήτων των διαφόρων φάσεων που εισέρχονται στις εξισώσεις πολυφασικών/διφασικών ροών και προκαλούν συχνά σύγχυση .

##### 2.1.4.1. Αέρια Φάση

Όσον αφορά την αέρια (ή αντίστοιχα υγρή, ανάλογα το μέσο ρευστοποίησης) φάση γίνεται η χρήση μονάχα μίας πυκνότητας:

$$\text{Πυκνότητα Αέριας Φάσης: } \rho_g = \frac{m_g}{V_g} \quad (2.5)$$

##### 2.1.4.2. Στερεά Φάση

Στη στερεά φάση εμπλέκονται τρεις διαφορετικές πυκνότητες, οι οποίες είναι η φυσική πυκνότητα του υλικού του στερεού  $\rho_{mat}$  (material density), η πυκνότητα του σωματιδίου  $\rho_s$  (particle density) και η φαινόμενη πυκνότητα  $\rho_b$  (bulk density) της στερεάς φάσης.

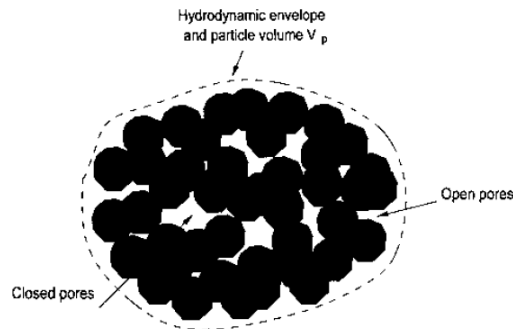
Η φυσική πυκνότητα σχετίζεται αποκλειστικά με το υλικό από το οποίο αποτελείται το σωματίδιο και συμπίπτει με την πυκνότητα του σωματιδίου μόνο στην περίπτωση συμπαγών σωματιδίων. Για πορώδη σωματίδια η πυκνότητά τους διαφέρει από την πυκνότητα του υλικού και για τον υπολογισμό της χρησιμοποιείται ο περικλειόμενος όγκος (hydrodynamic envelope volume) του σωματιδίου, ο οποίος περιέχει τόσο τους εξωτερικούς (ανοικτούς) πόρους όσο και τους εσωτερικούς (κλειστούς) πόρους (Σχήμα 2.1).

Η πυκνότητα σωματιδίου δίνεται από τη σχέση:

$$\rho_s = \frac{m_p}{V_p} \quad (2.6)$$

Η φαινόμενη ταχύτητα αφορά όλα τα σωματίδια σε ένα όγκο έλεγχου ( υπολογιστικό κελί) και δίνεται από τη σχέση:

$$\rho_b = \sum \frac{m_{p,i}}{V_{p,i}} = \frac{m_s}{V_s} = \frac{m_s}{\varepsilon_s V_{cell}} \quad (2.7)$$



Σχήμα 2.1 Πόροι Σωματιδίου (Yang, 2003)

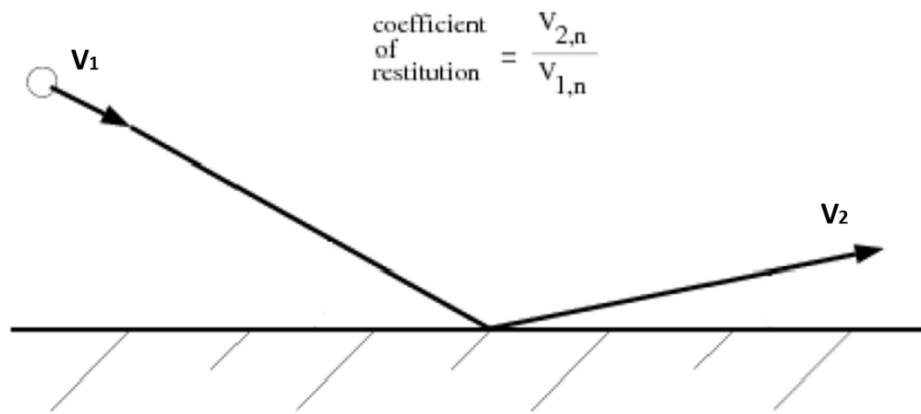
Για παράδειγμα, για ένα σωματίδιο αποτελούμενο 100% από CaO ισχύουν τα εξής:  $\rho_{mat} = 3320 \text{ kg/m}^3$ ,  $\rho_s = 1650 \text{ kg/m}^3$   $\rho_b \sim 950 \text{ kg/m}^3$ .

### 2.1.5. Συντελεστής Αποκατάστασης

Ο συντελεστής αποκατάστασης (coefficient of restitution ή reflection coefficient)  $e_{si}$  αποτελεί χαρακτηριστική ιδιότητα του υλικού των σωματιδίων και εξαρτάται από τις ιδιότητες των υλικών των σωμάτων που συμμετέχουν στην κρούση, ειδικά τις σκληρότητές τους αλλά και από την ταχύτητα κρούσης (πρόσπτωσης). Η τελευταία είναι και η αιτία που πειραματικά δεν θεωρείται σταθερός (Ατσόνιος, 2010). Ορίζεται ως ο λόγος της ταχύτητας ανάκλασης προς την ταχύτητα πρόσπτωσης [Εξίσωση ((2.8)] και εκφράζει την ορμή που παραμένει στο σωματίδιο μετά την κρούση και την απώλεια ενέργειας κατά την διάρκεια της. Συνεπώς χαρακτηρίζει την κρούση που έλαβε χώρα. Για παράδειγμα,  $e_{si} = 1$  σημαίνει ότι σωματίδιο διατήρησε όλη την ορμή του (ελαστική κρούση), ενώ  $e_{si} = 0$  δηλώνει μηδενισμό της ταχύτητας και δημιουργία συσσωματώματος (πλαστική κρούση). Οτιδήποτε ενδιάμεσο δηλώνει ανελαστική κρούση. Διακρίνεται σε δύο συντελεστές με βάση τα σώματα που λαμβάνουν μέρος στην κρούση, τον  $e_{ss}$  για κρούσεις μεταξύ σωματιδίων και των  $e_{sw}$  (Σχήμα 2.2) για κρούσεις μεταξύ σωματιδίων και τοιχωμάτων.

$$e = \frac{\text{Ταχύτητα Ανάκλασης}}{\text{Ταχύτητα Πρόσπτωσης}} \quad (2.8)$$

Ειδικότερα για κρούσεις μεταξύ σωματιδίων και τοιχωμάτων ορίζονται δύο συντελεστές με βάση την κατεύθυνση, ο κάθετος στο τοίχωμα συντελεστής αποκατάστασης  $e_{sw,n}$  και ο εφαπτομενικός  $e_{sw,t}$ . Αφορούν την ορμή και την ταχύτητα του σωματιδίου μετά την κρούση κατά την κάθετη και εφαπτομενική στο τοίχωμα διεύθυνση αντίστοιχα.

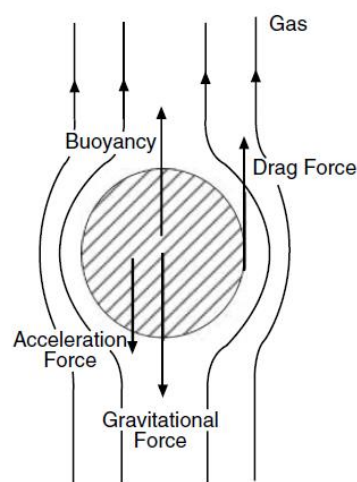


Σχήμα 2.2 Κάθετος Συντελεστής Αποκατάστασης Σωματιδίου-Τοιχώματος  $e_{sw,n}$  (ANSYS Inc., 2012a)

### 2.1.6. Τερματική Ταχύτητα

Η τερματική (terminal) ταχύτητα  $u_t$  ορίζεται ως η σχετική ταχύτητα ( $u_t = u_g - u_s$ ) για την οποία η συνισταμένη των δυνάμεων κατά την κάθετη διεύθυνση πάνω στο σωματίδιο είναι ίση με μηδέν και αυτό δεν επηρεάζεται από γειτονικά σωματίδια. Τότε, σ' αυτή τη διεύθυνση ασκούνται τρεις δυνάμεις η βαρυτική (gravitational force), η άνωση (buoyancy) και η οπισθέλκουσα (drag force) λόγω της ροής του ρευστού. Πριν την εύρεση της τερματικής ταχύτητα απαιτείται ο ορισμός του συντελεστή οπισθέλκουσας  $C_D$ , ο οποίος ορίζεται ως ο λόγος της οπισθέλκουσας προς την δυναμική πίεση πολλαπλασιασμένη με την μετωπική επιφάνεια του σωματιδίου και δίνεται από την εξής σχέση:

$$C_D = \frac{F_D}{\frac{1}{2} \rho_g u^2 \pi \frac{d_p^2}{4}} \Rightarrow F_D = C_D \frac{\pi d_p^2 \rho_g u^2}{4} \quad (2.9)$$



Σχήμα 2.3 Ισορροπία Δυνάμεων σ' ένα σωματίδιο (Basu, 2006)

Για τον υπολογισμό της τερματικής ταχύτητας χρησιμοποιείται η σχέση των (Haider & Levenspiel, 1989), η οποία κάνει χρήση της αδιάστατης διαμέτρου  $d_p^*$  και ταχύτητας  $u_t^*$ . Οι σχετικές σχέσεις παρατίθενται κάτωθι:

$$u_t = u_t^* \left[ \frac{\mu_g (\rho_s - \rho_g) g}{\rho_g^2} \right]^{1/3} \quad (2.10)$$

$$u_t^* = \left[ \frac{18}{(d_p^*)^2} + \frac{2.335 - 1.744\varphi}{(d_p^*)^{0.5}} \right]^{-1} \quad 0.5 < \varphi \leq 1 \quad (2.11)$$

$$d_p^* = d_p \left[ \frac{\rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_g^2} \right]^{1/3} \quad (2.12)$$

### 2.1.7. Οπισθέλκουσα Δύναμη

Η οπισθέλκουσα δύναμη για πλήθος σωματιδίων ανά μονάδα όγκου δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$f_D = \beta \varepsilon_s (\vec{u}_g - \vec{u}_s) = \beta \varepsilon_s \vec{u}_{slip} \quad (2.13)$$

Για τον υπολογισμό του συντελεστή εναλλαγής ορμής  $\beta$  και του συντελεστή οπισθέλκουσας  $C_D$  έχουν αναπτυχθεί αρκετά μοντέλα. Ωστόσο, για πολυφασικές πυκνές (σε στερεά φάση) ροές τα μοντέλα που κρίνονται πιο κατάλληλα είναι αυτά των (Syamlal & O' Brien, 1987), (Wen & Yu, 1966), (Gidaspow, 1994) και το πιο εξελιγμένο EMMS. Από αυτά τα μοντέλα, τα τρία πρώτα αναφέρονται ως συμβατικά/ομογενή μοντέλα, ενώ το τελευταίο είναι ένα σχετικά νέο μοντέλο, που διαφέρει σημαντικά από τα υπόλοιπα. Στην υποενότητα αυτή θα παρουσιαστούν μόνο τα δύο τελευταία μοντέλα, καθότι αυτά είναι τα πιο διαδεδομένα και γι' αυτά έχουν πραγματοποιηθεί υπολογιστικές προσομοιώσεις στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας.

#### 2.1.7.1. Μοντέλο Gidaspow

Το συμβατικό αυτό μοντέλο αποτελεί συνδυασμό των σχέσεων των (Wen & Yu, 1966) και (Ergun, 1952). Οι σχέσεις αυτές παρατίθενται ακολούθως:

- Σχέση του Ergun:

$$\beta = 150 \frac{\varepsilon_s \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + 1.75 \frac{\rho_g |\vec{u}_g - \vec{u}_s|}{d_p} \quad \varepsilon_g < 0.8 \quad (2.14)$$

- Σχέση των Wen & Yu:

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_g \rho_g |\vec{u}_g - \vec{u}_s|}{d_p} \varepsilon_g^{-2.65} \quad \varepsilon_g \geq 0.8 \quad (2.15)$$

όπου,

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} [1 + 0.15 Re^{0.687}] & Re < 1000 \\ 0.44, & Re \geq 1000 \end{cases} \quad \& Re = \frac{\varepsilon_g \rho_g d_p |\vec{u}_g - \vec{u}_s|}{\mu_g} \quad (2.16)$$

### 2.1.7.2. Μοντέλο EMMS

Το κύριο πρόβλημα των συμβατικών μοντέλων οπισθέλκουσας είναι η υπόθεση ομοιογενών συνθηκών μέσα στον όγκο ελέγχου (κελί) (Ge et al., 2008). Η υπόθεση όμως της ομοιογενούς διασποράς των σωματιδίων έχει ως συνέπεια να μην λαμβάνονται υπόψη τα συμπλέγματα (clusters), τα οποία σχηματίζονται υπό συνθήκες ταχέας ρευστοποίησης και αποτελούν κύριο χαρακτηριστικών των κλινών που λειτουργούν σε τέτοιες συνθήκες. Η παρουσία των συμπλεγμάτων, όμως, έχει καταλυτική επίδραση στην ορμή, τη μεταφορά θερμότητας και μάζας καθώς και στους ρυθμούς αντίδρασης εντός της κλίνης (Wang et al., 2008). Ειδικότερα, όσον αφορά την ορμή, η ανταλλαγή ορμής μεταξύ αέριας και στερεάς φάσης πραγματοποιείται μέσω της οπισθέλκουσας δύναμης, η οποία μειώνεται σημαντικά όταν τα σωματίδια σχηματίζουν clusters και δεν είναι ομοιόμορφα διασκορπισμένα (Zhang et al., 2011). Αποτέλεσμα αυτού είναι η υπερεκτίμηση της ασκούμενης οπισθέλκουσας δύναμης, ιδιαίτερα σε αραιά πλέγματα και ως εκ τούτου να παρατηρούνται σημαντικές αποκλίσεις από τις πειραματικές μετρήσεις (Hartge et al., 2009).

Το μοντέλο EMMS (Energy Minimization Multi-Scale analysis – πολυδιαστατική ανάλυση της ελαχιστοποίησης ενέργειας) είναι ένα υποπλεγματοτικό μοντέλο που λαμβάνει υπόψη τα συμπλέγματα των κόκκων και για το λόγο αυτό δεν είναι αναγκαία η χρήση πυκνών πλεγμάτων. Η ακριβής πρόλεξη του μεγέθους των συμπλεγμάτων είναι ακόμα ένα θέμα που δεν έχει επιλυθεί και οφείλεται στο γεγονός ότι οι δομές αυτές των σωματιδίων μεταβάλλονται στο χώρο και στο χρόνο, αλλάζοντας συνεχώς μέγεθος, σχήμα και πυκνότητα (Nikolopoulos et al., 2010a).

Στην συνέχεια πραγματοποιείται μια συνοπτική παρουσίαση, για λόγους πληρότητας, του μοντέλου EMMS που εφαρμόστηκε, το οποίο περιγράφεται αναλυτικά στο επιστημονικό άρθρο των (Zeneli et al., 2015). Το κύριο χαρακτηριστικό του συγκεκριμένου μοντέλου είναι, ότι στην πρόλεξη του μεγέθους των συμπλεγμάτων, λαμβάνεται υπόψη η διάμετρος της κλίνης, η οποία θέτει ένα άνω όριο.

Τα μοντέλα EMMS εισάγουν ένα αδιάστατο συντελεστή ανομοιογένειας  $H_d$  [σχέση (2.17)], ο οποίος εισάγεται στο κλασικό μοντέλο των (Wen & Yu, 1966) και μ' αυτό τον τρόπο γίνεται η ενσωμάτωση της ετερογένειας. Το EMMS απαιτεί την διαίρεση της πολυφασικής ροής σε τρεις περιοχές, την πυκνή (dense) όπου κυριαρχούν τα σωματίδια, την αραιή (dilute) όπου κυριαρχεί η αέρια φάση και την τρίτη αποτελεί η διεπιφάνεια (inter-phase) μεταξύ των δύο προαναφερθέντων περιοχών.

$$H_d = \frac{F_{Wen \& Yu}}{F_{EMMS}} = \frac{\beta_{Wen \& Yu} u_{slip}}{\beta_{EMMS} u_{slip}} = \frac{\beta_{Wen \& Yu}}{\beta_{EMMS}} \quad (2.17)$$

Ο συντελεστής ανομοιογένειας  $H_d$  προκύπτει από την επίλυση ενός μη γραμμικού συστήματος ελαχιστοποίησης. Σ' αυτό το σύστημα η αντικειμενική συνάρτηση αφορά την ελαχιστοποίηση της ενέργειας  $N_{st}$  που απαιτείται για την αιώρηση και μεταφορά των σωματιδίων. Το προαναφερθέν σύστημα απαιτεί τη χρήση τεχνικών μη

γραμμικού προγραμματισμού, οι οποίες υλοποιούνται με τη χρήση κώδικα FORTRAN. Στα επόμενα ακολουθεί μια συνοπτική παρουσίαση των βασικών εξισώσεων που απαρτίζουν το εν λόγω σύστημα.

### Αναλυτικές Εξισώσεις:

Ισορροπία Δυνάμεων για την Πυκνή Φάση:

$$\frac{3}{4} C_{dc} \frac{f(1-\varepsilon_c)}{d_p} \rho_g U_{sc}^2 + \frac{3}{4} C_{di} \frac{f}{d_{cl}} \rho_g U_{si}^2 = f(1-\varepsilon_c)(\rho_s - \rho_g)(g + \alpha_c) \quad (2.18)$$

Ισορροπία Δυνάμεων για την Αραιή Φάση:

$$\frac{3}{4} C_{df} \frac{(1-f)(1-\varepsilon_f)}{d_p} \rho_g U_{sf}^2 = (1-f)(1-\varepsilon_f)(\rho_s - \rho_g)(g + \alpha_f) \quad (2.19)$$

Ισορροπία Πτώση Πίεσης μεταξύ clusters και Αραιής Φάσης:

$$C_{df} \frac{(1-\varepsilon_f)}{d_p} \rho_g U_{sf}^2 + \frac{f}{1-f} C_{di} \frac{\rho_g U_{si}^2}{d_{cl}} = C_{dc} \frac{(1-\varepsilon_c)}{d_p} \rho_g U_{sc}^2 \quad (2.20)$$

Εξίσωση Διατήρησης Μάζας Αέριας Φάσης:

$$U_g = U_f(1-f) + U_{cf} \quad (2.21)$$

Εξίσωση Διατήρησης Μάζας Στερεάς Φάσης:

$$U_s = U_{pf}(1-f) + U_{pcf} \quad (2.22)$$

Ορισμός Μέσου Κλάσματος Όγκου:

$$\varepsilon_g = f\varepsilon_c + (1-f)\varepsilon_f \quad (2.23)$$

$$\varepsilon_g + \varepsilon_s = 1 \quad (2.24)$$

### Ημιαμπειρικές/Εμπειρικές Συσχετίσεις:

Συσχέτιση για την Διάμετρο των Cluster (Li & Kwauk, 1994):

$$D_{cl} = \frac{d_p \left[ \frac{U_s}{1-\varepsilon_{max}} - (U_{mf} + \frac{\varepsilon_{mf} U_s}{1-\varepsilon_{mf}}) \right] g}{\frac{N_{st} \rho_s}{\rho_s - \rho_g} + (U_{mf} + \frac{\varepsilon_{mf} U_s}{1-\varepsilon_{mf}}) g} \quad (2.25)$$

Συσχέτιση για την Διάμετρο των Cluster (Subbarao, 2010):

$$D_{cl} = D_v \left( \frac{f}{1-f} \right)^{1/2} + d_p \quad (2.26)$$

Από τις εξισώσεις (2.25) και (2.26) επιλέγεται κάθε φορά αυτή που δίνει μικρότερη διάμετρο.

Συσχέτιση για τη Διάμετρο των Φυσαλίδων (void size):

$$D_v = \frac{2u_t^2}{g} \left( 1 + \frac{u_t^2}{u_{sr}^2} \right)^{-1} \quad (2.27)$$

Συσχέτιση για τη Ταχύτητα Αναβράζουσας Κλίνης Μεγάλων Φυσαλίδων (slug velocity):

$$u_{sr} = 0.35(gD_t)^{1/2} \quad (2.28)$$

Για του υπολογισμό της τερματικής ταχύτητας γίνεται χρήση των εξισώσεων (2.10), (2.11) και (2.12).

Συσχέτιση για το Κλάσμα Όγκου της Στερεάς Φάσης στην Πυκνή Φάση (Wang et al., 2008):

$$\varepsilon_c = \varepsilon_g - n\sigma_\varepsilon \quad n = 3 \text{ (Soong et al., 1995)} \quad (2.29)$$

Η τυπική απόκλιση για το κλάσμα όγκου της στερεάς φάσης στη πυκνή φάση θεωρείται ότι ακολουθεί την κατανομή Poisson (Wang et al., 2008):

$$\sigma_\varepsilon = \varepsilon_s \sqrt{\frac{(1 - \varepsilon_s)^4}{1 + 4\varepsilon_s + 4\varepsilon_s^2 - 4\varepsilon_s^3 + \varepsilon_s^4}} \quad (2.30)$$

Αντικειμενική Συνάρτηση (Ελαχιστοποίηση  $N_{st}$ ):

$$N_{st} = \frac{1}{(1 - \varepsilon_g)\rho_s} [m_f F_f U_f + m_c F_c U_c + m_i F_i U_f (1 - f)] \rightarrow \min \quad (2.31)$$

Οι προηγούμενες εξισώσεις πλαισιώνονται επίσης από ένα σύνολο ανισώσεων, που λειτουργούν ως όρια, καθώς και από σχέσεις για τον υπολογισμό των  $C_D$ ,  $Re$ ,  $U_{slip}$ ,  $F_D$  και των παροχών της στερεάς φάσης για τις τρεις επιμέρους περιοχές (πυκνή, αραϊή, διεπιφάνεια), οι οποίες δεν παρατίθενται για λόγους συντομίας. Το σύστημα, των προηγούμενων εξισώσεων, λύνεται για 6 διαφορετικές ταχύτητες ολίσθησης (0.5, 1, 2, 3, 4, 5) και για διακριτές τιμές του όγκου κλάσματος της αέριας φάσης, οι οποίες βρίσκονται στο φάσμα από  $\varepsilon_{mf}$  έως  $\varepsilon_{max}$ . Έτσι, μέσω παρεμβολής προκύπτουν πολυώνυμα 6<sup>ου</sup> βαθμού τα οποία περιγράφουν τον συντελεστή ανομοιογένειας συναρτήσει του κλάσματος όγκου και είναι διαφορετικά για κάθε ταχύτητα ολίσθησης. Για τις υπόλοιπες ταχύτητες ο συντελεστής ανομοιογένειας (heterogeneity index) προκύπτει μέσω γραμμικής παρεμβολής.

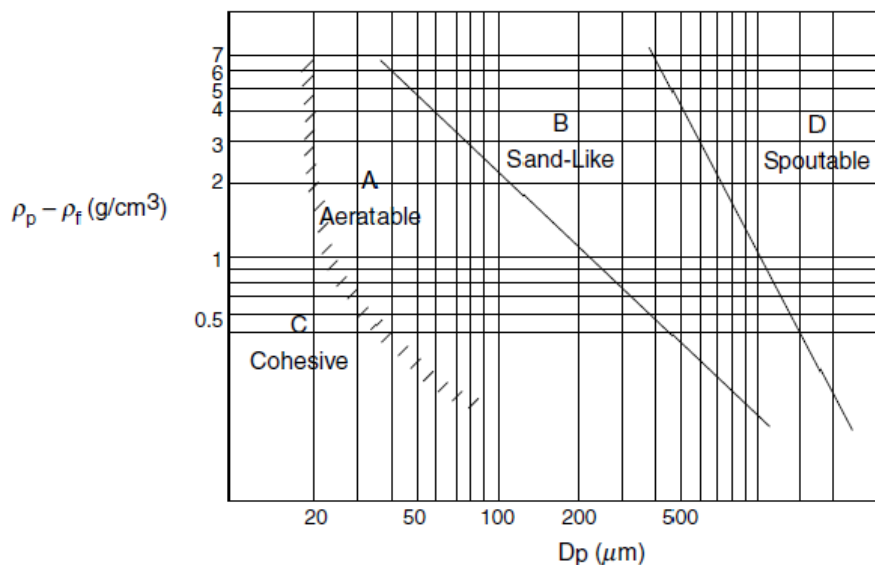
Τελικά, ο συντελεστής εναλλαγής ορμής για το EMMS  $\beta_{EMMS}$  υπολογίζεται με βάση τις σχέσεις (2.15) (Σχ. Wen & Yu) και (2.17) και προκύπτει ίσος με:

$$\beta_{EMMS} = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g \varepsilon_g |\vec{u}_g - \vec{u}_s|}{d_p} \varepsilon_g^{-2.65} \frac{1}{H_d} \quad (2.32)$$



Στη παρούσα εργασία το μοντέλο του EMMS που εφαρμόστηκε, αναπτύχθηκε από το Εργαστήριο Ατμοκινητήρων & Λεβήτων της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών και παρουσιάζεται αναλυτικά στην εργασία των (Zeneli et al., 2015). Η εφαρμογή και ενσωμάτωσή του στο μοντέλο περιγραφής κατά Lagrange, έλαβε χώρα ύστερα από κατάλληλη ανάπτυξη κώδικα.

## 2.2. Κατηγοριοποίηση Σωματιδίων



Σχήμα 2.4 Κατηγοριοποίηση Σωματιδίων κατά Geldart (Basu, 2006)

Η κατηγοριοποίηση κατά (Geldart, 1973) γίνεται με βάση της πυκνότητας και της διαμέτρου των σωματιδίων, όπως φαίνεται στο Σχήμα. Στη συνέχεια γίνεται μια σύντομη περιγραφή των κατηγοριών:

### Κατηγορία Α

Έχουν διάμετρο μεταξύ 20 – 90  $\mu\text{m}$  και χαρακτηρίζονται από μικρές πυκνότητες. Ρευστοποιούνται πολύ εύκολα, δηλαδή απαιτείται μικρή ταχύτητα ρευστού (μικρή  $u_{mf}$ ) και σχηματίζουν φυσαλίδες για μεγαλύτερες ταχύτητες. Σ' αυτή την κατηγορία ανήκουν οι FCC καταλύτες.

### Κατηγορία Β

Η διάμετρος του κυμαίνεται μεταξύ 90 και 650  $\mu\text{m}$ . Η ρευστοποίησή τους είναι εύκολη και για ταχύτητα ρευστού ίση με την  $u_{mf}$  εμφανίζουν τις πρώτες φυσαλίδες. Τυπικό παράδειγμα αυτής της κατηγορίας είναι η άμμος θαλάσσης.

### Κατηγορία C

Τα σωματίδια αυτά έχουν μέγεθος μικρότερο των 90  $\mu\text{m}$  για μικρές πυκνότητες, ενώ για πυκνότητες μεγαλύτερες από 1  $\text{g}/\text{cm}^3$  έχουν ακόμα μικρότερο μέγεθος. Η ρευστοποίησή τους είναι δύσκολη λόγω των μεγάλων συνεκτικών δυνάμεων που αναπτύσσονται μεταξύ τους. Σ' αυτή τη κατηγορία ανήκει το αλεύρι.

## **Κατηγορία D**

Σε αυτή τη κατηγορία ανήκουν τα μεγαλύτερα σωματίδια, καθότι η διάμετρός τους είναι μεγαλύτερη από 650  $\mu\text{m}$ . Δεν ρευστοποιούνται εύκολα, ενώ για ταχύτητες ίσες με  $u_{mf}$  εμφανίζονται οι πρώτες φυσαλίδες. Οι κόκκοι του καφέ, τα μπιζέλια κ.α. είναι σωματίδια που ανήκουν στην κατηγορία αυτή.

### 3. Τεχνικές Μοντελοποίησης Ροής σε Ρευστοποιημένες Κλίνες – Κινητική Θεωρία Κοκκωδών Ροών (KTFG)

#### 3.1. Τεχνικές Μοντελοποίησης Ροής σε Ρευστοποιημένες Κλίνες

Τα ρευστομηχανικά φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα στις ρευστοποιημένες κλίνες είναι πολύπλοκα και δύσκολα στη μοντελοποίηση, λόγω των πολυφασικών ροών που επικρατούν σ' αυτές. Στη μοντελοποίηση πολυφασικών ροών με μεθόδους υπολογιστικής ρευστοδυναμικής διακρίνονται δυο προσεγγίσεις, η Euler-Euler και η Euler-Lagrange. Οι όροι Euler και Lagrange αναφέρονται στις δυνατές μεθόδους περιγραφής των πεδίων ροής. Στην πρώτη, το ρευστό αντιμετωπίζεται ως συνεχές μέσο και η μέθοδος εξετάζει τις μεταβολές των ιδιοτήτων του ρευστού σε μια ορισμένη περιοχή, καθώς την καταλαμβάνουν συνεχώς διαφορετικά στοιχεία ρευστού. Αντίθετα, στην περιγραφή κατά Lagrange το ρευστό δεν θεωρείται συνεχές μέσο, αλλά ότι αποτελείται από διακριτά στοιχεία και εξετάζεται η κίνηση και οι μεταβολές στις ιδιότητες καθενός στοιχείου ξεχωριστά, καθώς αυτό κινείται στο πεδίο (Παπαϊωάννου, 2002a). Έτσι, σε μια διφασική ροή η μέθοδος Euler-Euler θεωρεί και τις δύο φάσεις ως συνεχή μέσα (Gidaspow, 1994) και καλείται με τον όρο Two Fluid Model (TFM), ενώ στην Euler-Lagrange μόνο η μία φάση θεωρείται συνεχής (αέρια φάση) και η άλλη ως διακριτή (στερεά φάση).

Η Euler-Lagrange, ανάλογα με τον τρόπο που υπολογίζονται οι κρούσεις μεταξύ σωματιδίων και μεταξύ σωματιδίων-τοιχώματος, διακρίνεται στις μεθόδους που μοντελοποιούν άμεσα (explicit) αυτές τις αλληλεπιδράσεις και σ' αυτές που τις μοντελοποιούν έμμεσα (implicit). Οι πρώτες καλούνται ντετερμινιστικές (Deterministic Euler-Lagrange Model) και επειδή συχνά κάνουν χρήση του μοντέλου της ελαστικής σφαίρας (soft sphere model) (Cundall & Strack, 1979), αναφέρονται με τον όρο Discrete Element Method (DEM) (Zeneli et al., 2014). Οι έμμεσες μέθοδοι καλούνται στοχαστικές (Stochastic Euler-Lagrange Method) και αναφέρονται συχνά με τους όρους Multiphase Particle-In-Cell (MP-PIC) και Dense Discrete Phase Model (DDPM) [ (Andrews & O'Rourke, 1996), (O'Rourke & Snider, 2012)]. Στις μεθόδους αυτές, οι κρούσεις της διακριτής-στερεάς φάσης μοντελοποιούνται ως η κλίση ( $\nabla P_s$ ) ενός όρου πίεσης (Snider, 2001).

Η στοχαστική μέθοδος αποτελεί την πιο πρόσφατη από τις τρεις τεχνικές και παρουσιάζει συγκριτικά πλεονεκτήματα, όπως η δυνατότητα ενσωμάτωσης κατανομής σωματιδίων (PSD) με χαμηλό υπολογιστικό κόστος και η άμεση προσομοίωση των οριακών συνθηκών στα τοιχώματα (Sundaresan, 2011). Η τελευταία είναι αδύνατη στην μέθοδο TFM, ενώ όσον αφορά την PSD είναι πολύ δύσκολη (Νικολόπουλος, 2014). Το χαμηλό υπολογιστικό κόστος είναι πολύ σημαντική παράμετρος, καθώς τα προηγούμενα πλεονεκτήματα ισχύουν και για τη DEM, αλλά το κόστος της είναι απαγορευτικό για την εφαρμογή της σε κλίνες βιομηχανικής κλίμακας, παρότι προσφέρει την μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με τις

άλλες δύο τεχνικές. Το απαγορευτικό κόστος της DEM οφείλεται στην άμεση μοντελοποίηση των κρούσεων του κάθε σωματιδίου, η οποία απαιτεί τη γνώση των ιδιοτήτων των γειτονικών σωματιδίων που περιβάλλουν ένα σωματίδιο και τον υπολογισμό της κάθε κρούσης ξεχωριστά.

Το υπολογιστικό κόστος φαίνεται χαρακτηριστικά στον Πίνακα, όπου παρουσιάζεται το υπολογιστικό κόστος προσομοίωσης μιας αναβράζουσας κλίνης μεγάλων φυσαλίδων (slugging regime) διαμέτρου 78 mm και ύψους 6 m, η οποία περιέχει 3.6 kg στερών σωματιδίων Geldart B, με χρήση 6 CPUs (Zeneli et al., 2014).

Πίνακας 3-1 Υπολογιστικό Κόστος για Διαφορετικές Τεχνικές (Zeneli et al., 2014)

Μέθοδος	TFM	DDPM (100000 parcel)	DEM (50000 parcel)	DEM (100000 parcel)	DEM (200000 parcel)
Υπολογιστικός Χρόνος (min)	3030	805	7829	10823	19514

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αναφερθεί η δυνατότητα των τεχνικών Euler-Lagrange να χρησιμοποιούν υπολογιστικά σωματίδια (parcels) αντί πραγματικών. Τα parcels είναι αριθμητικές αναπαραστάσεις σωματιδίων, τα οποία έχουν ίδιες ιδιότητες, όπως διάμετρο, πυκνότητα, ταχύτητα κ.ο.κ. Μ' αυτό τον τρόπο καθίσταται εφικτός ο υπολογισμός των αλληλεπιδράσεων-κρούσεων μεταξύ των σωματιδίων με σημαντικά μικρότερο υπολογιστικό κόστος (ANSYS Inc., 2012b). Ένα επιπλέον κοινό στοιχείο των τεχνικών αυτών είναι ένας περιορισμός που τίθεται σχετικά με το ελάχιστο επιτρεπτό μέγεθος των κελιών του υπολογιστικού πλέγματος. Ο λόγος του χαρακτηριστικού μήκους των κελιών προς τη διάμετρο των parcel πρέπει να είναι μεγαλύτερος της μονάδας, καθότι μία τιμή κοντά στην μονάδα θα έχει ως αποτέλεσμα εξαιρετικά μεγάλες διακυμάνσεις στις τιμές των κλασμάτων όγκου, όποτε ένα parcel εισέρχεται ή εξέρχεται από ένα κελί (Zeneli et al., 2014).

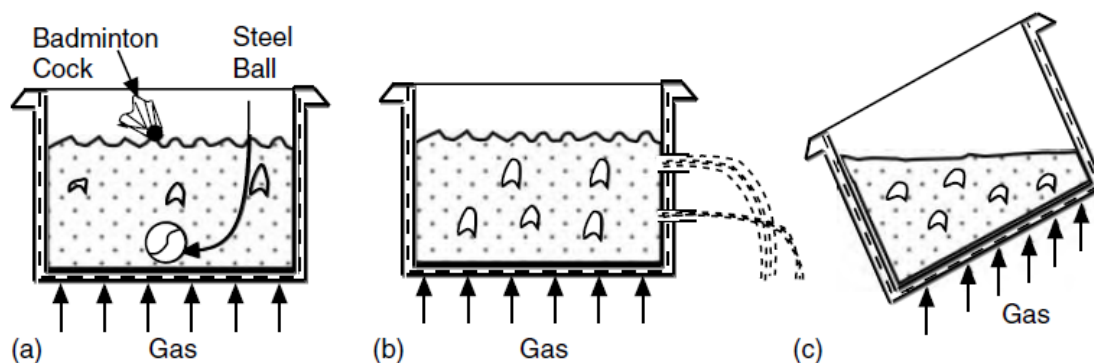
Ένας τρόπος αντιμετώπισης αυτού του προβλήματος, έχει επιτευχθεί με την υιοθέτηση ξεχωριστού πλέγματος για τα σωματίδια (particle-grid method). Σ' αυτή την περίπτωση, τα μεγέθη που αφορούν την αέρια και τη στερεά φάση αντίστοιχα υπολογίζονται σε διαφορετικά πλέγματα. Αυτό επιτρέπει τη χρήση πλεγμάτων για το ρευστό ανεξάρτητων από το μέγεθος των parcel (Alobaid et al., 2013). Ένα, επιπλέον, πρόβλημα που παρουσιάζουν οι Euler-Lagrange είναι η δυσκολία διατήρησης του κλάσματος όγκου της στερεάς φάσης σε επίπεδα κατώτερα της μέγιστης τιμής (packing limit). Καθώς, οι κόκκοι κινούνται διαμέσου των κελιών είναι δύσκολο να επιβάλλονται τέτοιοι περιορισμοί. Δεν παρατηρούνται, ωστόσο, αντίστοιχες ιδιαιτερότητες, όταν η στερεά φάση αντιμετωπίζεται και αυτή ως συνεχές.

Ένα επιπλέον χαρακτηριστικό της μεθόδου DDPM, το οποίο αφορά το υπολογιστικό κόστος και θα προσφέρει συγκριτικό πλεονέκτημα, έναντι των άλλων μεθόδων, είναι η δυνατότητα χρήσης των επεξεργαστών των καρτών γραφικών (Graphic Process Unit - GPU). Σε αντίθεση με τη DDPM, οι DEM και TFM δεν είναι τόσο ενδεδειγμένες τεχνικές για την χρήση υβριδικών συστημάτων CPU – GPU [ (Li et al., 2012), (Adamczyk et al., 2013)]. Η μοντελοποίηση των κρούσεων μέσω της κλίσης

πίεσης της στερεάς φάσης  $P_s$ , επιτρέπει στα σωματίδια να κινούνται ανεξάρτητα το ένα από το άλλο, σε όρους αριθμητικής προσομοίωσης, χωρίς να ανταλλάσσουν πληροφορίες επιτρέποντας τη χρήση GPU, οι οποίες μπορούν να χειριστούν την παράλληλη επεξεργασία ανεξάρτητων δεδομένων (Xiong et al., 2010). Συνεπώς, αναμένεται η δυνατότητα αποτελεσματικής προσομοίωσης της κίνησης εκατομμυρίων σωματιδίων στο μέλλον (Zeneli et al., 2014). Στις επόμενες υποενότητες γίνεται μια σύντομη περιγραφή των κύριων στοιχείων και των βασικών σχέσεων των προαναφερθέντων τεχνικών.

### 3.1.1. Two Fluid Method

Στη μέθοδο αυτή οι δύο φάσεις μοντελοποιούνται ως συνεχή αλληλοδιαπερατά μέσα. Η σκέψη για περιγραφή της στερεάς φάσης, ως συνεχούς μέσου οφείλεται στο γεγονός ότι η πολυφασική ροή στις κλίνες συμπεριφέρεται ως ρευστό (Σχήμα 3.1). Για την περιγραφή της στερεάς φάσης, ως ρευστού δεν επαρκούν οι «κλασικές» Navier- Stokes και απαιτείται μια γενικευμένη μορφή τους, η οποία να περιλαμβάνει όρους που απαντώνται στις κοκκώδεις ροές, όπως η κοκκώδης πίεση και οι κοκκώδεις διατμητικές τάσεις. Για τα μεγέθη αυτά απαιτείται η χρήση εξισώσεων της Κινητικής Θεωρίας των Κοκκωδών Ροών (KTGF).



Σχήμα 3.1 Συμπεριφορά της Κλίνης ως Ρευστού (Basu, 2006)

Σ' αυτό το σημείο πρέπει να τονιστεί ότι οι σχέσεις για τον υπολογισμό μεγεθών που σχετίζονται με την κινητική θεωρία είναι ίδιες μ' αυτές που χρησιμοποιούνται από τη DDPM, η οποία χρησιμοποιείται στα πλαίσια της διπλωματικής αυτής, και παρουσιάζονται αναλυτικά στο επόμενο κεφάλαιο. Ακολούθως παρατίθενται οι Navier-Stokes που χρησιμοποιούνται από την TFM για διφασική ροή (αέριο-στερεό):

Εξίσωση Συνέχειας για την Αέρια Φάση:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) = 0 \quad (3.1)$$

Εξίσωση Συνέχειας για τη Στερεά Φάση:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) = 0 \quad (3.2)$$

Εξίσωση Διατήρησης Ορμής για την Αέρια Φάση:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}_g + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} - \varepsilon_s \beta (\vec{u}_g - \vec{u}_s) \quad (3.3)$$

Εξίσωση Διατήρησης Ορμής για τη Στερεά Φάση:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\varepsilon_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot \vec{\tau}_s + \varepsilon_s \rho_s \vec{g} + \varepsilon_s \beta (\vec{u}_s - \vec{u}_g) \quad (3.4)$$

### 3.1.2. Dense Discrete Phase Model

Στη μέθοδο αυτή οι κρούσεις μεταξύ των σωματιδίων υπολογίζονται έμμεσα μέσω μίας δύναμης, η οποία προκύπτει από την KTGF. Η δύναμη αυτή εκφράζεται μέσα από την χωρική κλίση της κοκκώδους πίεσης (Adamczyk et al., 2013). Στη διακριτή φάση, η κίνηση των σωματιδίων προκύπτει από την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης κίνησης του καθενός ξεχωριστά και η οποία προκύπτει από το 2<sup>ο</sup> Νόμο του Νεύτωνα. Η αλληλεπίδραση με την αέρια φάση προκύπτει από εφαρμογή του 3<sup>ου</sup> Νόμου του Νεύτωνα. Σ' αυτό το σημείο κρίνεται σκόπιμο να γίνει μια διάκριση μεταξύ των μεθόδων DPM και DDPM που χρησιμοποιεί το εμπορικό πακέτο ANSYS FLUENT. Στην μέθοδο DPM, σε αντίθεση με τη DDPM, αμελούνται οι κρούσεις μεταξύ των σωματιδίων. Αυτή όμως η απλούστευση απαιτεί από τη στερεά φάση πολύ μικρά κλάσματα όγκου, ώστε να είναι αποδεκτή. Ωστόσο, αυτές οι συνθήκες, όμως, δεν ικανοποιούνται στις ρευστοποιημένες κλίνες κάνοντας την DPM ακατάλληλη για τέτοιες εφαρμογές (ANSYS Inc., 2012b). Κάτωθι παρουσιάζονται μόνο οι βασικές εξισώσεις που περιγράφουν τη ροή και την κίνηση των σωματιδίων.

Η εξίσωση συνέχειας είναι αυτή που δίνεται από την εξίσωση (3.1).

Εξίσωση Διατήρησης Ορμής:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}_g + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} - \vec{F}_{s \rightarrow g} \quad (3.5)$$

Όπου η  $\vec{F}_{s \rightarrow g}$  είναι ο όρος ανταλλαγής ορμής της αέριας με τη στερεά φάση (οπισθέλκουσα δύναμη) και δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\vec{F}_{s \rightarrow g} = \sum_{p=1}^{n_T} n_p \varepsilon_{s,p} \beta (\vec{u}_g - \vec{u}_s) \quad (3.6)$$

Στη σχέση (3.6) χρησιμοποιείται, επίσης συχνά, αντί της ταχύτητας του αερίου στο κελί, η ταχύτητα του αερίου στη θέση του σωματιδίου  $x_s$  (Benyahia & Sundaresan, 2011), η οποία προκύπτει από παρεμβολή μεταξύ των γειτονικών κελιών. Η ίδια ταχύτητα χρησιμοποιείται και για τον υπολογισμό του  $\beta$ . Συνεπώς ο όρος ανταλλαγής ορμής προκύπτει και από την ακόλουθη σχέση:

$$\vec{F}_{s \rightarrow g} = \sum_{p=1}^{n_T} n_p \varepsilon_{s,p} \beta (\vec{u}_g(\vec{x}_s) - \vec{u}_s) \quad (3.7)$$

.Εξισώσεις Κίνησης των Σωματιδίων:

$$\rho_s \frac{d\vec{u}_s}{dt} = \vec{g}(\rho_s - \rho_g) + \frac{\beta}{\varepsilon_g} (\vec{u}_g - \vec{u}_s) + \vec{F}_{KTGF} + \vec{F}_{other} \quad (3.8)$$

$$\frac{d\vec{x}_s}{dt} = \vec{u}_s \quad (3.9)$$

Όπου ο όρος  $\vec{F}_{other}$  περιλαμβάνει οποιαδήποτε άλλη δύναμη ασκείται πάνω στο σωματίδιο, όπως η άντωση (Saffman's lift force), η δύναμη Basset κ.ο.κ.

### 3.1.3. Discrete Element Method

Στη μέθοδο αυτή οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων υπολογίζονται άμεσα με χρήση του μοντέλου της ελαστικής σφαίρας. Στο μοντέλο αυτό, τα σωματίδια μπορούν να παραμορφώνονται και να αλληλοεπικαλύπτονται. Η παραμόρφωση αυτή μετριέται ως η αλληλοεπικάλυψη που έλαβε χώρα μεταξύ δύο σωματιδίων ή μεταξύ σωματιδίου-τοιχώματος, ενώ μοντελοποιείται συνήθως είτε ως σύστημα ελατηρίου – αποσβεστήρα είτε με χρήση της τριβής Coulomb. Οι αλληλεπιδράσεις των σωματιδίων υπολογίζονται μέσω ολοκλήρωσης των εξισώσεων κίνησης σε χρονικό διάστημα (collision time scale), το οποίο εξαρτάται από τις ιδιότητες των υλικών και μπορεί να εκτιμηθεί από τη σχέση  $\pi \sqrt{\frac{m}{k}}$  (ANSYS Inc., 2012b).

Κρίνεται, επίσης, σκόπιμο να αναφερθεί ο τρόπος με τον οποίο επιλέγονται, τα parcel και τα τοιχώματα με τα οποία ένα parcel θα πραγματοποιήσει κρούσεις. Για την επιλογή αυτή χρησιμοποιείται μια γεωμετρική προσέγγιση. Το πεδίο ροής χωρίζεται σε ένα πλέγμα, στο οποίο το χαρακτηριστικό μέγεθος των κελίων του είναι πολλαπλάσιο της διαμέτρου του μεγαλύτερου parcel. Τότε, υπολογίζεται η δύναμη επαφής-κρούσης μόνο για τα parcel, τα οποία βρίσκονται σε γειτονικά κελία, ενώ για όλα τα υπόλοιπα θεωρείται μηδενική (ANSYS Inc., 2012b).

Οι εξισώσεις συνέχειας και διατήρησης ορμής για την αέρια φάση δίνονται από τις εξισώσεις (3.1) και (3.5). Με εφαρμογή του 2<sup>ου</sup> Νόμου του Νεύτωνα, η κίνηση ενός σωματιδίου-parcel περιγράφεται από τις ακόλουθες εξισώσεις:

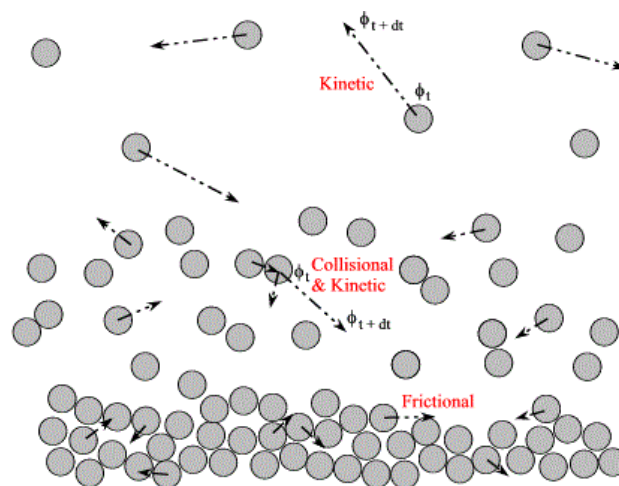
$$m \frac{d\vec{u}_s}{dt} = \vec{F}_{drag} + \vec{F}_{pressure} + \vec{F}_{virtual\_mass} + \vec{F}_{gravitation} + \vec{F}_{other} \quad (3.10)$$

$$\frac{d\vec{x}_s}{dt} = \vec{u}_s \quad (3.11)$$

Στην εξίσωση (3.10) οι λεπτομέρειες της ροής, όπως το οριακό στρώμα και ο σχηματισμό δινών, γύρω από το σωματίδιο αμελούνται (ANSYS Inc., 2012b). Η οπισθέλκουσα δύναμη βρίσκεται από τις σχέσεις (3.6) ή (3.7).

### 3.2. Κύρια Στοιχεία της Κινητικής Θεωρίας Κοκκωδών Ροών (KTGF)

Η κινητική θεωρία των κοκκωδών ροών θεμελιώθηκε πάνω στην κινητική θεωρία του Boltzmann για τα αέρια. Στις κοκκώδεις ροές τα σωματίδια και οι ταλαντώσεις των ταχυτήτων τους παραλληλίζονται με τα μόρια των αερίων και τις ταλαντώσεις που αυτά πραγματοποιούν (Νικολόπουλος, 2014). Ωστόσο, μεταξύ κόκκων και μορίων παρατηρούνται διαφορές, οι οποίες είναι αναγκαίο να λαμβάνονται υπόψη στα μοντέλα που αφορούν τις κοκκώδεις ροές. Οι κόκκοι δεν έχουν αμελητέο όγκο όπως τα μόρια των αερίων, αλλά καταλαμβάνουν σημαντικό ποσοστό στον όγκο ελέγχου και το κλάσμα όγκου τους δεν μπορεί να αμεληθεί. Οι κρούσεις μεταξύ των σωματιδίων είναι ανελαστικές σε αντίθεση με τις ελαστικές κρούσεις που παρατηρούνται στα μόρια. Μια άλλη, εξίσου, σημαντική διαφορά είναι η επίδραση της αέριας φάσης στη πολυφασική ροή. Καθώς δύο σωματίδια πλησιάζουν μεταξύ τους, η αντίσταση του αερίου που βρίσκεται στο μεταξύ τους διάκενο και μπορεί να λάβει τιμές που μπορεί ακόμα και να εμποδίσουν την κρούση των σωματιδίων. Όλα αυτά τα χαρακτηριστικά είναι αναγκαίο να λαμβάνονται υπόψη (Darteville, 2003).



Σχήμα 3.2 Οι Τρεις Μορφές Ιξώδους Διάχυσης σε Κοκκώδη Ροή (Darteville, 2003)

Όπως, ήδη έχει αναφερθεί οι κόκκοι θεωρούνται ότι ταλαντώνονται και κινούνται χαοτικά στο χώρο. Για μικρά κλάσματα όγκου η χαοτική κίνηση οφείλεται στη ροή του αερίου (οπισθέλκουσα, τύρβη, αλλαγές στη πίεση κ.λπ.), ενώ για μεγαλύτερα στις, μεταξύ των σωματιδίων και των τοιχωμάτων, κρούσεις. Η αναλογία με την κινητική θεωρία των αερίων οδηγεί στον ορισμό μιας «ψευδοθερμοκρασίας», με βάση τον ορισμό της θερμοκρασίας ως συνέπεια της κίνησης των μορίων, που καλείται κοκκώδης θερμοκρασία  $\Theta_s$  και δίνεται από την κάτωθι σχέση:

$$\theta_s = \frac{1}{3} \langle c^2 \rangle \quad (3.12)$$

$$\langle c^2 \rangle = \frac{c_1^2 + c_2^2 + \dots + c_n^2}{n}, \quad n \rightarrow \infty \quad (3.13)$$

Το μέγεθος  $\langle c^2 \rangle$  είναι η μέση τιμή των τετραγώνων των ταχυτήτων της στοχαστικής κίνησης των σωματιδίων. Πρέπει να τονιστεί ότι η  $\Theta_s$  δεν εκφράζει τον ρυθμό των



κρούσεων, αλλά μετράει την ταχύτητα της στοχαστικής κίνησης και ως εκ τούτου λαμβάνει τη μέγιστη τιμή της για μικρά κλάσματα όγκου (αραιή περιοχή) (Dartevelle, 2003).

Η θεώρηση των κόκκων ως μορίων οδηγεί στην αντιμετώπιση του συνόλου των κόκκων ως ρευστού πολύ μεγάλης πυκνότητας. Αυτό έχει ως συνέπεια την δυνατότητα αναγνώρισης ιδιοτήτων των ρευστών στη στερεή φάση, όπως δυναμικό ιξώδες (shear viscosity)  $\mu_s$ , συστολικό ιξώδες (bulk viscosity)  $\lambda_s^1$ , «θερμοδυναμική» πίεσης  $p_s$ . Η ύπαρξη συνεκτικότητας σημαίνει την ανάπτυξη ιξωδών τάσεων και κατά συνέπεια την ανάγκη ορισμού τανυστή ιξωδών τάσεων  $\tau_s$ . Ο  $\tau_s$  οφείλει να είναι σε θέση να περιγράφει τις αναπτυσσόμενες τάσεις σε όλο το εύρος των κλασμάτων όγκου που μπορεί να λάβει η στερεά φάση. Αυτό, όμως, δεν είναι κάτι απλό καθώς ανάλογα με τη τιμή του κλάσματος παρατηρούνται διαφορετικά φαινόμενα μεταξύ των σωματιδίων. Για το λόγο αυτό είναι απαραίτητο να περιγραφούν αυτά τα φαινόμενα (Σχήμα 3.2), τα οποία μπορούν να ταξινομηθούν σε τρεις κατηγορίες (Dartevelle, 2003):

- i. Σε πολύ αραιές περιοχές ( $\epsilon_s \approx 0$ ) τα σωματίδια κινούνται τυχαία χωρίς να επηρεάζονται από τα υπόλοιπα σωματίδια. Αυτή η μορφή ιξώδους διάχυσης<sup>2</sup> και τάσεων καλείται κινητική (kinetic).
- ii. Για μεγαλύτερα κλάσματα όγκου, τα σωματίδια αρχίζουν και συγκρούονται μεταξύ τους επιβάλλοντας μία επιπλέον διάχυση, εκτός της κινητικής, η οποία λέγεται προσκρουστική (collisional).
- iii. Για πολύ μεγάλα κλάσματα όγκου ( $\epsilon_s > 0.5$ ), τα σωματίδια αρχίζουν να ολισθαίνουν μεταξύ τους και συνεπώς να αναπτύσσονται δυνάμεις τριβής. Αυτή η μορφή διάχυσης καλείται τριβική (frictional). Σ' αυτό το σημείο, καθώς ο όγκος που καταλαμβάνει η στερεά φάση, η διάχυση λόγω τριβής κυριαρχεί και η κινητική και προσκρουστική διάχυση σχεδόν μηδενίζονται. Σ' αυτή την κατάσταση τα σωματίδια βρίσκονται σε επαφή για χρονικά διαστήματα, τα οποία δεν μπορούν να θεωρηθούν στιγμιαία και γι' αυτό η κατάσταση αυτή δεν μπορεί να περιγραφεί πλέον από την KTGF, αλλά στηρίζεται στη τριβή Coulomb και απαιτεί χρήση της Πλαστικής Θεωρίας.

Τα παραπάνω φαινόμενα περιγράφονται στον  $\tau_s$  μέσω της διατμητικής συνεκτικότητας, η οποία ισούται με το άθροισμα της κινητικής, προσκρουστικής και τριβικής συνεκτικότητας όπου η κάθε μία εκφράζει και την αντίστοιχη μορφή ιξώδους διάχυσης.

---

<sup>1</sup> Το διαστολικό ιξώδες εμφανίζεται σε ρευστά των οποίων τα μόρια πέραν της μεταφορικής εκτελούν περιστροφική κίνηση ή/και ταλαντώσεις (Παπαϊωάννου, 2002a). Στη στερεά φάση εκφράζει την αντίσταση ενός κόκκου στη συμπίεση και στη διάγκωση του (ANSYS Inc., 2012b).

<sup>2</sup> Στις τυρβώδεις ροές, η κινητική ενέργεια της τύρβης είναι η ενέργεια που αφαιρείται από την κύρια ροή κατά το σχηματισμό της τύρβης. Η ενέργεια αυτή, υπό την επίδραση των ιξωδών δυνάμεων (ιξώδης διάχυση) μετατρέπεται σε θερμική ενέργεια (Παπαϊωάννου, 2002b).



## 4. Αναλυτική Περιγραφή Τεχνικής MP-PIC/DDPM & Παράμετροι

### 4.1. Εισαγωγή – Γεωμετρία

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η διερεύνηση της μοντελοποίησης MP-PIC μέσω της αριθμητικής προσομοίωσης της υδροδυναμικής συμπεριφοράς μιας πιλοτικής μονάδας, η οποία υλοποιεί στον Κύκλο CaO/CaCO<sub>3</sub> τη δέσμευση του CO<sub>2</sub>. Η ισχύς της μονάδας είναι 1 MW<sub>th</sub>. Η μονάδα βρίσκεται στο Πανεπιστήμιο του Darmstadt (Ströhle et al., 2014) και αποτελείται από δύο υδροδυναμικά συζευγμένους αντιδραστήρες ρευστοποιημένης κλίνης ανακυκλοφορίας (DFB), οι οποίοι αποτελούν τον ενανθρακωτή (carbonator) και των ασβεστοποιητή (calciner). Στον πρώτο γίνεται η δέσμευση του CO<sub>2</sub> και στον δεύτερο η αναγέννηση του CaO. Η εργασία αυτή ακολουθεί την διεθνή τάση για κλίνες μεγάλης κλίμακας, που προκρίνει την προσομοίωση μονάχα του αγωγού ανόδου (riser) αντί του πλήρη κύκλου (Xie et al., 2008). Ο λόγος πίσω από αυτή την τάση είναι οι μικρότερες απαιτήσεις σε υπολογιστικό κόστος, με απαραίτα κανόνα πάντα την επιβολή των σωστών οριακών συνθηκών.

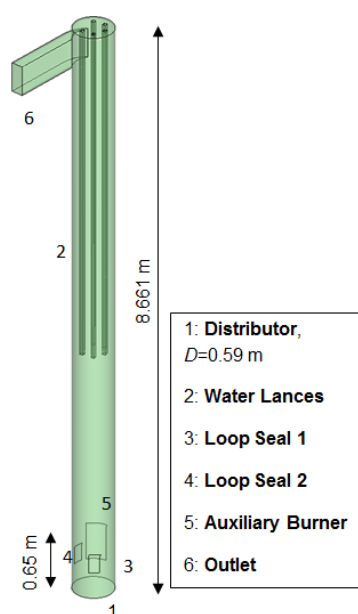
Στο Σχήμα 4.1 παρουσιάζεται ο ενανθρακωτής, ενώ για την πλήρη περιγραφή και γεωμετρία της εγκατάστασης, ο αναγνώστης παραπέμπεται στο επιστημονικό άρθρο των (Ströhle et al., 2014). Η κλίνη του ενανθρακωτή έχει ύψος 8.661 m και εσωτερική διάμετρο αγωγού 0.59 m. Ο αγωγός 1 (ανακυκλοφορητής στεγανοποίησης ή loop seal<sup>1</sup>), συνδέει τον ενανθρακωτή με τον κυκλώνα του, ο οποίος βρίσκεται τοποθετημένος μετά την έξοδο της κλίνης και μέσω αυτού επιστρέφουν τα σωματίδια που διέφυγαν από την κλίνη και συλλέχθηκαν από αυτόν. Αντίθετα ο αγωγός 2 (loop seal 2) συνδέει τον ενανθρακωτή με τον ασβεστοποιητή και μέσω αυτού επιστρέφουν τα αναγεννημένα σωματίδια.

Ο βοηθητικός καυστήρας (auxiliary burner) χρησιμοποιείται για την σταθεροποίηση της θερμοκρασίας, εντός της κλίνης. Οι αγωγοί ψύξης (water lances) χρησιμοποιούν εξωτερικό νερό ψύξης και χρησιμοποιούνται για την απαγωγή της παραγόμενης ενέργειας κατά τη δέσμευση του CO<sub>2</sub> (εξώθερμη αντίδραση). Είναι τοποθετημένοι παράλληλα με τον κύριο άξονα της κλίνης, προκειμένου να περιορίζεται κατά το δυνατόν η φθορά τους, καθώς βρίσκονται υπό συνεχές καθεστώς αμμοβολής ενώ επιδρούν στην υδροδυναμική της κλίνης μειώνοντας την υδραυλική διάμετρο. Η έξοδος (outlet) είναι τοποθετημένη στη μία πλευρά, οδηγώντας σε μη συμμετρικό σχήμα. Τα κύρια χαρακτηριστικά της εξόδου είναι ότι η διατομή της είναι μικρότερη από αυτή της κλίνης, ενώ σχηματίζει γωνία 90° με τον κύριο άξονά της. Σκοπός

---

<sup>1</sup> Loop seal ή ανακυκλοφορητής στεγανοποίησης ονομάζεται ένα είδος βαλβίδας που δεν χρησιμοποιεί μηχανικά μέρη.

αυτής της σχεδίασης είναι η αύξηση της κατακράτησης των σωματιδίων εντός της κλίνης, προκειμένου να μεγαλώσει ο χρόνος παραμονής τους, εντός της κλίνης (Grace et al., 2003), χωρίς όμως να μεγαλώνει πολύ η πτώση πίεσης.



Σχήμα 4.1 Σχηματική Αναπαράσταση της Κλίνης του Ενανθρακωτή (Zeneli et al., 2015)

Η αριθμητική επίλυση της ροής απαιτεί τη διακριτοποίηση της κλίνης σε υπολογιστικά κελιά. Στην υπ' όψη διπλωματική εργασία χρησιμοποιήθηκε ένα αραιό τρισδιάστατο πλέγμα που αποτελείται από 31207 εξαεδρικά κελιά (δομημένο πλέγμα). Η πυκνότητα του πλέγματος εκφράζεται ως ο λόγος του χαρακτηριστικού μήκους του μέσου κελιού ως προς τη διάμετρο Sauter των σωματιδίων (Νικολόπουλος, 2014). Ο όγκος του μέσου κελιού προκύπτει από τον συνολικό όγκο της κλίνης διαιρεμένο με το πλήθος των κελιών που τον απαρτίζουν. Για το συγκεκριμένο πλέγμα η πυκνότητα του προκύπτει ίση με  $I_f=465.54$ . Με βάση τους (Ge et al., 2008), η πυκνότητα που απαιτείται, θεωρητικά, για μεγάλη ακρίβεια μοντελοποίησης μέσω των συμβατικών μοντέλων οπισθέλκουσας (π.χ. Gidasrow) πρέπει να αντιστοιχεί σε  $I_f$  μικρότερο ή ίσο του 20. Ωστόσο, τόσο πυκνά πλέγματα είναι αδύνατο να εφαρμοστούν λόγω του εξαιρετικά υψηλού υπολογιστικού κόστους τους. Η απαίτηση των μεθόδων MP-PIC, ο λόγος του χαρακτηριστικού μήκους του κελιού προς τη διάμετρο του parcel να είναι μεγαλύτερος της μονάδας ικανοποιείται, ενώ για την περίπτωση χρήσης 400000 υπολογιστικών σωματιδίων (η πιο συνήθης περίπτωση στα σενάρια του Κεφαλαίου 5), ο λόγος έχει τιμή ίση με 4.62.

Η μοντελοποίηση μονάχα του ενανθρακωτή έκανε αναγκαία την χρήση κωδικών (UDF), οι οποίοι υλοποιήθηκαν στα πλαίσια της διπλωματικής αυτής και ενσωματώθηκαν στο εμπορικό πακέτο ANSYS FLUENT 15.0 που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση της ροής. Στο πακέτο αυτό η εισαγωγή σωματιδίων σ' ένα υπολογιστικό πεδίο, γίνεται μέσω «εγχύσεων» (injection). Συγκεκριμένα, το αρχικό πλήθος των parcel εισάγεται μέσω ενός injection, το οποίο διαβάζει από ένα αρχείο τις αρχικές θέσεις τους. Χρησιμοποιείται ένα UDF που καταγράφει το πλήθος των

parcel που διαφεύγουν της κλίνης από την έξοδο, καθώς και τις ιδιότητές τους. Στη συνέχεια γίνεται χρήση ενός κώδικα-UDF, ο οποίος εισάγει στο πεδίο τα σωματίδια που διέφυγαν με τις αντίστοιχες ιδιότητές τους. Για να πραγματοποιηθεί αυτή η διαδικασία απαιτείται η διαγραφή των parcel που εξέρχονται της κλίνης και η εισαγωγή αντίστοιχων νέων μέσω διαφορετικών injection. Επειδή μας ενδιαφέρει μόνο η υδροδυναμική της κλίνης, η εισαγωγή γίνεται αποκλειστικά από το loop seal 1, ανεξάρτητα αν προέρχονται από τον ασβεστοποιητή ή τον κυκλώνα του ενανθρακωτή, το οποίο μοντελοποιείται ως οριακή συνθήκη σε πεπερασμένο πλήθος κελιών κα γι' αυτό απαιτεί τη χρήση περισσότερων του ενός injection. Επιπλέον, πραγματοποιήθηκε η παραλληλοποίηση του προηγούμενου κώδικα, κατά τη διαδικασία της οποίας προέκυψαν αρκετά προβλήματα, με κυριότερα τα σχετικά με την ανταλλαγή δεδομένων μεταξύ των κόμβων.

Πέραν των προαναφερθέντων κωδικών χρησιμοποιούνται UDF για τον υπολογισμό μεγεθών που προκύπτουν από τη κινητική θεωρία, τα οποία έχουν υλοποιηθεί και χρησιμοποιηθεί επιτυχώς σε προσομοιώσεις TFM από τον Δρ. Άρη Νικολόπουλο, ενώ το udf για την ενσωμάτωση του Μοντέλου EMMS αναπτύχθηκε από την κ. Μυρτώ Ζενέλη.

## 4.2. Αναλυτική Παρουσίαση Μοντέλου MP-PIC

Η ροή περιγράφεται από 4 μερικές διαφορικές εξισώσεις (οι εξισώσεις για τα χημικά στοιχεία αφορούν μόνο τις προσομοιώσεις στις οποίες η αέρια φάση θεωρείται μίγμα αερίων), που αφορούν την αέρια φάση και από δύο συνήθεις διαφορικές εξισώσεις για κάθε υπολογιστικό σωματίδιο, δηλαδή 2N εξισώσεις συνολικά για τη στερεά φάση, με N το πλήθος των υπολογιστικών σωματιδίων σε όλο το πεδίο. Οι άγνωστοι είναι η ταχύτητα της αέριας φάσης, οι ταχύτητες των σωματιδίων, η πίεση, το κλάσμα όγκου της αέριας φάσης, καθώς και τα κλάσματα μάζας (μόνο όταν έχουμε μίγμα) των συστατικών της αέριας φάσης. Συγκεκριμένα, ανάλογα την προσομοίωση, η αέρια φάση θεωρείται ότι αποτελείται μόνο από άζωτο ή από άζωτο, οξυγόνο και διοξείδιο του άνθρακα (μίγμα αερίων). Στη περίπτωση μίγματος, τα κλάσματα μάζας του O<sub>2</sub> και του CO<sub>2</sub> προκύπτουν από την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων, ενώ το κλάσμα του N<sub>2</sub> προκύπτει ως το υπόλοιπο της αφαίρεσης των προηγούμενων δύο κλασμάτων από την μονάδα. Η επιλογή του αζώτου να υπολογίζεται κατ' αυτό τον τρόπο, οφείλεται στο γεγονός ότι είναι το κύριο συστατικό στοιχείο του αερίου.

Στα επόμενα γίνεται αναλυτική παρουσίαση των προαναφερθέντων διαφορικών εξισώσεων, καθώς και όλων των απαραίτητων συμπληρωματικών εξισώσεων που απαιτούνται για την αριθμητική επίλυσή τους.

Εξίσωση συνέχειας για την αέρια φάση:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) = 0 \quad (4.1)$$

Εξίσωση Διατήρησης Ορμής για την αέρια φάση:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \overline{u_g}) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \overline{u_g} \overline{u_g}) = -\varepsilon_g \nabla p + \nabla \cdot \overline{\tau_g} + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} - \vec{F}_{s \rightarrow g}, \quad (4.2)$$

Εξίσωση διατήρησης των χημικών στοιχείων της αέριας φάσης:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \varepsilon_g Y_i^g) + \nabla \cdot (\rho_g \varepsilon_g \overline{u_g} Y_i^g) = -\nabla \cdot \varepsilon_g \overline{J_i^g}, \quad \text{όπου } i = 1, 2 \quad (4.3)$$

Εξισώσεις κίνησης των σωματιδίων:

$$\rho_s \frac{d\overline{u_s}}{dt} = \vec{g}(\rho_s - \rho_g) + \frac{\beta}{\varepsilon_g}(\overline{u_g} - \overline{u_s}) + \vec{F}_{KTGF} \quad (4.4)$$

$$\frac{d\overline{x_s}}{dt} = \overline{u_s} \quad (4.5)$$

Στην κίνηση των σωματιδίων θεωρείται ότι επιδρούν μόνο οι δυνάμεις βαρύτητας, οπισθέλκουσας και λόγω κρούσεων και τριβών με τα σωματίδια και τοιχώματα. Αντίθετα, αμελούνται δυνάμεις, όπως δύναμη επιπρόσθετης μάζας (“virtual mass” force), δύναμη λόγω διαφοράς πίεσης (pressure gradient force), , άντωση (Saffman’s lift force) και δυνάμεις λόγω τύρβης, διότι η ροή θεωρείται στρωτή.

Δυνάμεις λόγω κρούσεων και τριβών (Adamczyk et al., 2013):

$$\vec{F}_{KTGF} = -\nabla p_s + \nabla \overline{\tau_s} \quad (4.6)$$

Η κοκκώδης πίεση δίνεται από τη σχέση των (Patankar & Joseph, 2001), (Snider et al., 1997):

$$p_s = \frac{P^* \varepsilon_s^\beta}{\varepsilon_{s,max} - \varepsilon_s} \quad (4.7)$$

ή τη σχέση των (Lun et al., 1984):

$$p_s = \varepsilon_s \rho_s \theta_s + 2\rho_s(1 + e_{ss})\varepsilon_s^2 g_0 \theta_s \quad (4.8)$$

Στη σχέση (4.7) το μέγεθος  $P^*$  είναι μία σταθερά με μονάδες πίεσης και το  $\beta$  μια εκθετική σταθερά. Στη παρούσα διπλωματική εργασία, για τις σταθερές αυτές χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές των (Benyahia & Sundaresan, 2011), οι οποίες είναι αντίστοιχα  $P^* = 100 \text{ Pa}$  και  $\beta = 2$ .

Τανυστής τάσεων για την αέρια φάση:

$$\overline{\tau_g} = \varepsilon_g \mu_g (\nabla \overline{u_g} + \nabla \overline{u_g}^T) - \varepsilon_g \left( \lambda_g - \frac{2}{3} \mu_g \right) (\nabla \cdot \overline{u_g}) \overline{I}, \quad \text{όπου } \lambda_g = 0 \quad (4.9)$$

Τανυστής τάσεων για την στερεά φάση:

$$\bar{\tau}_s = \varepsilon_s \mu_s (\nabla \bar{u}_s + \nabla \bar{u}_s^T) - \varepsilon_s \left( \lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) (\nabla \cdot \bar{u}_g) \bar{I} \quad (4.10)$$

Δυναμική συνεκτικότητα:

$$\mu_s = \mu_{s,kin} + \mu_{s,col} + \mu_{s,fr} \quad (4.11)$$

Η δυναμική συνεκτικότητα της στερεάς φάσης προκύπτει ως το άθροισμα της κινητικής, της προσκρουστικής και της τριβικής συνεκτικότητας. Οι τρεις αυτές συνεκτικότητες δίνονται από τις ακόλουθες σχέσεις (Gevrin et al., 2008), (Dartevelle, 2003):

$$\mu_{s,kin} = \frac{\sqrt{\pi \theta_s} \frac{d_p \rho_s}{24 \varepsilon_s g_0} (5 + 2 \varepsilon_s g_0 (1 + e_{ss}) (3e_{ss} - 1))}{\left( 1 + \frac{45 \mu_g}{6 \varepsilon_s g_0 d_p \rho_s \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} (1 + e_{ss}) (3e_{ss} - 1)} \right)} \quad (4.12)$$

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \varepsilon_s \rho_s g_0 (1 + e_{ss}) \left( \frac{\mu_{s,kin}}{\rho_s} + d_p \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \right) \quad (4.13)$$

$$\mu_{s,fr} = \begin{cases} \frac{p_{fr} \sin^2 \varphi_{fr}}{\varepsilon_s \sqrt{4 \sin^2 \varphi_{fr} \Pi_{dD} + (\nabla \cdot \bar{u}_s)^2}}, & \varepsilon_s \geq \varepsilon_{fr} \\ 0, & \varepsilon_s < \varepsilon_{fr} \end{cases} \quad (4.14)$$

Η κινητική συνεκτικότητα μπορεί να δοθεί επίσης από τη σχέση (Gidaspow et al., 1992):

$$\mu_{s,kin} = \frac{10 \rho_s d_p \sqrt{\theta_s \pi}}{96 (1 + e_{ss}) g_0} \left[ 1 + \frac{4}{5} g_0 \varepsilon_s (1 + e_{ss}) \right]^2 \quad (4.15)$$

Η πίεση τριβής  $p_{fr}$  θεωρείται ίση με την κοκκώδη πίεση  $p_s$ , και ως εκ τούτου ισχύει:

$$p_{fr} = p_s \quad (4.16)$$

Συστολική συνεκτικότητα της στερεάς φάσης (Dartevelle, 2003), (Lun et al., 1984):

$$\lambda_g = \begin{cases} \frac{4}{3} \varepsilon_s \rho_s d_p g_0 (1 + e_{ss}) \left( \frac{\theta_s}{\pi} \right)^{1/2}, & \varepsilon_s < \varepsilon_{fr} \\ \frac{p_{fr} \sin^2 \varphi_{fr}}{\varepsilon_s \sqrt{4 \sin^2 \varphi_{fr} \Pi_{dD} + (\nabla \cdot \bar{u}_s)^2}}, & \varepsilon_s \geq \varepsilon_{fr} \end{cases} \quad (4.17)$$

Η γενική σχέση εύρεσης της κοκκώδους θερμοκρασίας  $\theta_s$  δίνεται από τη μερική διαφορική εξίσωση:

$$\frac{3}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \theta_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \overline{u_s} \theta_s) \right] = (-p_s I + \overline{\tau_s}) : \nabla \overline{u_s} + \nabla \cdot (k_{\theta_s} \nabla \theta_s) - \gamma_{\theta_s} - 3\beta \theta_s \quad (4.18)$$

Ωστόσο η παραπάνω διαφορική μπορεί να απλοποιηθεί σε μια αλγεβρική εξίσωση, αν αμεληθούν οι όροι διάχυσης και συναγωγής. Αυτή η τακτική έχει χρησιμοποιηθεί από πολλούς συγγραφείς, όπως (Nikolopoulos et al., 2010b), (Van Wachem et al., 2001). Με βάση τη σχέση (4.18), προκύπτει η κάτωθι αλγεβρική εξίσωση:

$$0 = (-p_s I + \overline{\tau_s}) : \nabla \overline{u_s} - \gamma_{\theta_s} - 3\beta \theta_s \quad (4.19)$$

Ο λόγος καταστροφής ενέργειας  $\gamma_{\theta_s}$  εκφράζει την μετατροπή της κοκκώδους θερμοκρασίας σε θερμοδυναμική θερμοκρασία, εξαιτίας των ανελαστικών κρούσεων μεταξύ των σωματιδίων, ενώ μόνο για απόλυτα ελαστικές κρούσεις λαμβάνει τιμή μηδέν (Dartevelle, 2003). Δίνεται από τη σχέση:

$$\gamma_{\theta_s} = \frac{12(1 - e_{ss}^2)g_0}{d_p \sqrt{\pi}} \rho_s \varepsilon_s^2 \theta_s^{3/2} \quad (4.20)$$

Η συνάρτηση ακτινικής κατανομής των σωματιδίων  $g_0$  περιγράφει την πιθανότητα να βρεθούν δύο σωματίδια σε κοντινή απόσταση. Διορθώνει την πιθανότητα κρούσης προσμετρώντας την επίδραση των μη αμελητέων όγκων που καταλαμβάνουν τα σωματίδια, ενώ κύριος στόχος της είναι η πρόληψη της υπερσυγκέντρωσης των σωματιδίων (Dartevelle, 2003). Στην παρούσα διπλωματική εργασία, γίνεται χρήση της σχέσης των (Lun et al., 1984) για την συνάρτηση ακτινικής κατανομής, η οποία είναι η εξής:

$$g_0 = \left[ 1 - \left( \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,max}} \right) \right]^{-2.5\varepsilon_{s,max}} \quad (4.21)$$

Για την εύρεση της οπισθέλκουσας δύναμης, στις προσομοιώσεις του κεφαλαίου 5, χρησιμοποιήθηκε το συμβατικό μοντέλο του Gidaspow και το μοντέλο EMMS, τα οποία έχουν ήδη παρουσιαστεί στο κεφάλαιο 3 και καθαρά για λόγους πληρότητας επαναλαμβάνονται οι σχετικές εξισώσεις:

$$\vec{F}_{s \rightarrow g} = \sum_{p=1}^{n_T} n_p \varepsilon_{s,i} \beta (\overline{u_g} - \overline{u_s}), \quad (4.22)$$

$$\beta = \begin{cases} 150 \frac{\varepsilon_s \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + \frac{\rho_g |\overline{u_g} - \overline{u_s}|}{d_p} & \varepsilon_g < 0.8 \\ \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_g \rho_g |\overline{u_g} - \overline{u_s}|}{d_p} \varepsilon_g^{-2.65} & \varepsilon_g \geq 0.8 \end{cases} \quad (\text{Gidaspow}) \quad (4.23)$$

$$\beta_{EMMS} = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g \varepsilon_g |\overline{u_g} - \overline{u_s}|}{d_p} \varepsilon_g^{-2.65} \frac{1}{H_d} \quad (4.24)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} [1 + 0.15 Re^{0.687}] & Re < 1000 \\ 0.44, & Re \geq 1000 \end{cases} \quad \& Re = \frac{\varepsilon_g \rho_g d_p |\overline{u_g} - \overline{u_s}|}{\mu_g} \quad (4.25)$$



### 4.3. Αρχικοποίηση Στερεάς Φάσης

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η εισαγωγή της στερεάς φάσης στο πεδίο ροής γίνεται μέσω ενός injection που διαβάζει τις αρχικές θέσεις των σωματιδίων από ένα αρχείο. Για την εύρεση των αρχικών θέσεων και την αποφυγή υπερσυγκέντρωσης των σωματιδίων (υπέρβαση του packing limit) απαιτείται η εισαγωγή κάποιων περιορισμών, για τον υπολογισμό των οποίων έγινε χρήση των σχέσεων, που παρατίθενται στην επόμενη σελίδα.

Ωστόσο πριν την παράθεση των σχέσεων κρίνεται απαραίτητο να γίνει μια σύντομη αναφορά στις ιδιότητες της στερεάς φάσης. Η στερεά φάση θεωρείται ότι αποτελείται μονάχα από CaO με πυκνότητα σωματιδίου ίση με  $\rho_s = 1650 \text{ kg/m}^3$ . Ακόμα τα σωματίδια ακολουθούν την κατανομή του Πίνακα 4-1, για τον οποίο προκύπτει μέση διάμετρος Sauter ίση με  $d_p = 91,3 \text{ }\mu\text{m}$ . Με βάση αυτή τη διάμετρο από το Σχήμα 2.4 προκύπτει ότι είναι τύπου Geldart A.

Πίνακας 4-1 Κατανομή (PSD) Σωματιδίων Στερεάς Φάσης (Zeneli et al., 2015)

Εύρος	Μέση Διάμετρος Εύρους	Ποσοστό Κατά Μάζα	Αθροιστικό Ποσοστό κατά Μάζα
$\mu\text{m}$	$\mu\text{m}$	%	%
0-25	12,5	2,20%	2,20%
25-42	33,5	2,35%	4,55%
42-72	57	10,84%	15,39%
72-102	87	19,66%	35,05%
102-122	112	14,35%	49,40%
122-146	134	15,76%	65,16%
146-174	160	14,58%	79,74%
174-206	190	11,02%	90,76%
206-294	250	9,24%	100,00%

Για να μην γίνεται υπέρβαση του μέγιστου κλάσματος όγκου της στερεάς φάσης, πρέπει να τεθεί ένα άνω όριο στο μέγεθος των δυνατών υπολογιστικών σωματιδίων. Για το άνω όριο τίθεται επιπλέον ένας συντελεστής ασφαλείας, ο οποίος ισούται με  $S_f = 10$ . Η τιμή αυτή θεωρήθηκε ως μια καλή και ασφαλής εκτίμηση. Ο υπολογισμός των ανωτέρω γίνεται με εφαρμογή των ακόλουθων σχέσεων:

$$V_{\text{part,max}} = \frac{1}{2} \frac{V_{c,\text{min}} \varepsilon_{s,\text{max}}}{S_f}, S_f = 10 \quad (4.26)$$

$$V_{\text{part}} = n_p V_p \xrightarrow{\text{max}} n_{p,\text{max}} = \frac{V_{\text{part,max}}}{V_{\text{part}}} \quad (4.27)$$

Ένα κάτω όριο που πρέπει να τεθεί, αφορά το πλήθος των υπολογιστικών σωματιδίων, το οποίο προκύπτει για τη μέγιστη επιτρεπτή μάζα τους. Αυτό το όριο δεν πρέπει να παραβιάζεται, διότι σε αντίθετη περίπτωση μπορεί το κλάσμα όγκου της στερεάς φάσης να υπερβεί την ανώτατη επιτρεπτή τιμή του. Σ' αυτό το σημείο πρέπει να σημειωθεί ότι η συνολική μάζα της των σωματιδίων στη κλίση είναι 282 kg και πρέπει να διατηρείται σταθερή καθ' όλη τη διάρκεια λειτουργίας της κλίσης.

$$m_{\text{part,max}} = \varepsilon_{s,\text{max}} m_p \quad (4.28)$$

$$M_{tot} = N n_p m_{part} \Rightarrow N_{min} = \frac{M_{tot}}{m_{part,max}} \quad (4.29)$$

#### 4.4. Κατανομή Σωματιδιακών Όρων Πηγής μέσω Συντελεστών Βαρύτητας (Kernel)

Μεγέθη της στερεάς φάσης, όπως το η ταχύτητα των σωματιδίων και το κλάσμα όγκου, επηρεάζουν τη λύση των εξισώσεων της αέριας φάσης. Το ANSYS FLUENT έχει ως προεπιλεγμένη επιλογή, η επίδραση των μεγεθών αυτών να περιορίζεται στο υπολογιστικό κελί που βρίσκεται το κάθε σωματίδιο. Παράλληλα, όμως, έχει ως επιλογή την κατανομή της επίδρασης της στερεάς φάσης στους κόμβους του πλέγματος και μ' αυτό τον τρόπο και στα γειτονικά κελιά. Η δυνατότητα αυτή επιτρέπει τη μείωση της εξάρτησης των προσομοιώσεων από το πλέγμα, καθώς η επίδραση των μεγεθών αυτών κατανέμεται και στα γειτονικά κελιά, έχοντας ως αποτέλεσμα πιο ομοιογενείς κατανομές. Τα κυριότερα μεγέθη της στερεάς φάσης που κατανέμονται είναι η ταχύτητα, η θερμοκρασία, το κλάσμα όγκου, η συγκέντρωση, η οπισθέλκουσα, η κοκκώδης θερμοκρασία και οι όροι πηγής των σωματιδίων (ANSYS Inc., 2012b).

Η κατανομή της τιμής ενός μεγέθους  $\xi$  γίνεται με εφαρμογή της σχέσης:

$$\xi_{node} = \sum_k n_p w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) \xi_p \quad (4.30)$$

Η συνάρτηση  $w$  αποτελεί το συντελεστή βαρύτητας (weighting factor/kernel) και το ANSYS FLUENT δίνει τη δυνατότητα εφαρμογής οποιουδήποτε από τους ακόλουθους τέσσερις συντελεστές βαρύτητας:

α. Συντελεστής ισοκατανομής στους κόμβους (nodes-per-cell):

$$w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) = \frac{1}{\text{πλήθος κόμβων}} \quad (4.31)$$

β. Συντελεστής ελάχιστης απόστασης (shortest-distance):

$$w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) = \frac{1 - \frac{|\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}|}{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|}}{\sum_j \left( 1 - \frac{|\vec{x}_p^j - \vec{x}_{node}|}{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|} \right)} \Rightarrow$$

$$w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) = \frac{\frac{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}| - |\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}|}{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|}}{\sum_j \left( 1 - \frac{|\vec{x}_p^j - \vec{x}_{node}|}{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|} \right)} \quad (4.32)$$

$$w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) = \frac{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|, i \neq k}{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|} \left( 1 - \frac{|\vec{x}_p^j - \vec{x}_{node}|}{\sum_i |\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|} \right)$$

Από τη σχέση (4.32) διαπιστώνεται εύκολα ότι ο παρονομαστής του συντελεστή βαρύτητας έχει την ίδια τιμή για όλα τα σωματίδια ανεξαιρέτως, ενώ ο αριθμητής εξαρτάται από το άθροισμα όλων των σωματιδίων του όγκου ελέγχου, πλην του υπό εξέταση. Συνεπώς, ο συντελεστής αυτός λαμβάνει υπόψη την κατανομή των σωματιδίων στον όγκο ελέγχου αντί της τιμής του σωματιδίου που εξετάζει.

γ. Συντελεστής αντίστροφης απόστασης (inverse-distance):

$$w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) = \frac{1}{|\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}|} \frac{1}{\sum_i \frac{1}{|\vec{x}_p^i - \vec{x}_{node}|}} \quad (4.33)$$

Παρατηρώντας τη σχέση (4.33) διαπιστώνεται εύκολα ότι για διαφορετικά σωματίδια μόνο ο αριθμητής διαφοροποιείται, ο οποίος είναι αντιστρόφως ανάλογος της απόστασης του σωματιδίου από το κόμβο του πλέγματος.

δ. Συντελεστής Κατανομής Gauss:

$$w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) = \frac{\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-\alpha \frac{|\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}|^2}{\Delta x^2}\right)}{\sum_i [w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}^i)]} \quad (4.34)$$

Η σχέση (4.34) αποτελεί την εξίσωση της κατανομής Gauss. Το μέγεθος  $\Delta x$  είναι το χαρακτηριστικό μήκος του κελιού που περιέχει το υπολογιστικό σωματίδιο και το  $\alpha$  είναι μία παράμετρος, η οποία επιλέγεται από το χρήστη και καθορίζει την τυπική απόκλιση της κατανομής Gauss. Είναι φανερό, ότι η τιμή της προηγούμενης σχέσης είναι διαφορετική για κάθε σωματίδιο και δεν εξαρτάται από τα υπόλοιπα σωματίδια του όγκου ελέγχου, σε αντίθεση με τους δύο προηγούμενους συντελεστές βαρύτητας. Στη περίπτωση αυτή, η κανονικοποίηση της τιμής του συντελεστή βαρύτητας γίνεται με βάση τους κόμβους του κελιού, σε αντίθεση με τους προηγούμενους συντελεστές, όπου η κανονικοποίηση πραγματοποιείται με βάση το πλήθος των parcel.

## 4.5. Οριακές Συνθήκες & Παράμετροι

### 4.5.1. Μέθοδος Επίλυσης και Διακριτοποίηση

Για την επίλυση της ροής χρησιμοποιείται η συζευγμένη μέθοδος των φάσεων (Phase Coupled SIMPLE) που διαθέτει το ANSYS FLUENT. Σ' αυτή τη μέθοδο λαμβάνεται υπόψη η επίδραση της στερεάς φάσης στην αέρια και το αντίστροφο (two-way

coupling). Η επίδραση της μίας φάσης στην άλλη γίνεται μέσω της πίεσης και της οπισθέλκουσας δύναμης, ενώ η «σύζευξη» επιτυγχάνεται με την εναλλάξ επίλυση των δύο φάσεων μεταξύ των επαναλήψεων κατά τη διάρκεια ενός χρονικού βήματος (ANSYS Inc., 2012b).

Για την εύρεση της κλίσης των διαφορών μεγεθών των φάσεων χρησιμοποιείται η μέθοδος Green-Gauss Cell Based. Η διακριτοποίηση της ορμής, του κλάσματος όγκου και των κλασμάτων μάζας του O<sub>2</sub> και του CO<sub>2</sub> γίνεται με χρήση του σχήματος QUICK, η οποία βασίζεται σ' ένα σταθμισμένο μέσο μπρος και κεντρικών διαφορών δεύτερης τάξης. Η χρονική διακριτοποίηση πραγματοποιείται με χρήση του άρρητου σχήματος δεύτερης τάξης του ANSYS FLUENT, που καλείται Bounded Second Order Implicit. Ο αναγνώστης, για την αναλυτική περιγραφή των σχέσεων που διέπουν τα προηγούμενα σχήματα, μπορεί να καταφύγει στο (ANSYS Inc., 2012b). Τέλος, για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων κίνησης των σωματιδίων χρησιμοποιείται το άρρητο (implicit) σχήμα Euler που παρουσιάζεται στην επόμενη παράγραφο.

Η τροχιά ενός σωματιδίου, όπως έχει ήδη αναφερθεί, περιγράφεται από το σύστημα των συνήθων διαφορικών εξισώσεων (4.4) και (4.5). Η (4.4) μπορεί να γραφτεί στην ακόλουθη γενική μορφή (ANSYS Inc., 2012b):

$$\frac{du_s}{dt} = \frac{1}{\tau_p}(u_g - u_s) + a \quad (4.35)$$

Στην προηγούμενη εξίσωση ο όρος  $a$  περιλαμβάνει, όλες τις επιταχύνσεις που οφείλονται στις ασκούμενες, στο σωματίδιο, δυνάμεις πλην της οπισθέλκουσας. Το μέγεθος  $\tau_p$  ονομάζεται χρόνος χαλάρωσης του σωματιδίου (particle relaxation time), αποτελεί το χαρακτηριστικό χρόνο αντίδρασης του σωματιδίου στη ροή της αέριας φάσης και δίνεται από την σχέση:

$$\tau_p = \frac{\rho_s \varepsilon_s}{\beta} \quad (4.36)$$

Η εξίσωση (4.35) με εφαρμογή της άρρητης διακριτοποίησης Euler γράφεται στη μορφή:

$$u_s^{n+1} = \frac{u_s^n + \Delta t \left( a + \frac{u_g^n}{\tau_p} \right)}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_p}} \quad (4.37)$$

#### 4.5.2. Χρονικό Βήμα - Αριθμός Courant

Το χρονικό βήμα, που χρησιμοποιείται στην επίλυση μη μόνιμων ροών, πρέπει να είναι σε θέση να εξασφαλίζει, τόσο τη σύγκλιση των εξισώσεων ροής όσο και την ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Οι παραπάνω απαιτήσεις καλύπτονται όταν ο αδιάστατος αριθμός Courant έχει τιμή μικρότερης της μονάδας (Ferziger & Peric, 1999). Ο αριθμός αυτός εξαρτάται από τη μικρότερη διάσταση ( $\Delta Z_{\min}$ ) υπολογιστικού

κελιού του πλέγματος, τη μεγαλύτερη κατά μέτρο στιγμιαία ταχύτητα ( $u_{max}$ ) και από το χρονικό βήμα (Ατσόνιος, 2010). Ο αριθμός Courant δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$C = |u_{max}| \frac{\Delta t}{\Delta Z_{min}} \quad (4.38)$$

Στις αριθμητικές προσομοιώσεις της παρούσας διπλωματικής εργασίας χρησιμοποιήθηκε χρονικό βήμα ίσο με  $\Delta t = 0,0005s$  και ο αντίστοιχος αριθμός Courant προκύπτει ίσος με  $C \approx 3,279 \times 10^{-4}$ .

#### 4.5.3. Οριακές Συνθήκες – Ιδιότητες Αέριας και Στερεάς Φάσης

Στους επόμενους πίνακες παρατίθενται οι οριακές συνθήκες και οι ιδιότητες των δύο φάσεων (τα κλάσματα μάζας αφορούν μόνο την υπόθεση μίγματος, αλλιώς  $Y_{N_2}=1$ ).

Πίνακας 4-2 Οριακές Συνθήκες

Τμήμα	Τύπος Οριακής Συνθήκης	Μέγεθος	Τιμή	Μονάδες
Διασκορπιστής	Είσοδος Ταχύτητας	$u_{gas}$	1,930374	m/s
		$Y_{CO_2}$	0,1303555	kg/kg
		$Y_{O_2}$	0,1802782	kg/kg
		$Y_{N_2}$	0,6893663	kg/kg
Ανακυκλοφορητής Στεγανοποίησης 1	Είσοδος Παροχής Μάζας	$m_{gas}$	0,01152976	kg/s
		$Y_{O_2}$	0,23	kg/kg
		$Y_{N_2}$	0,77	kg/kg
Ανακυκλοφορητής Στεγανοποίησης 2	Είσοδος Παροχής Μάζας	$m_{gas}$	0,01912342	kg/s
		$Y_{O_2}$	0,23	kg/kg
		$Y_{N_2}$	0,77	kg/kg
Λέβητας	Είσοδος Παροχής Μάζας	$m_{gas}$	0,035888889	kg/s
		$Y_{O_2}$	0,23	kg/kg
		$Y_{N_2}$	0,77	kg/kg
Έξοδος	Έξοδος Πίεσης	P	99962	Pa
Τοιχώματα	Αέρια Φάση: Συνθήκη Μη Ολίσθησης	$e_{sw,t}$	1	-
		$e_{sw,n}$	1	-

Πίνακας 4-3 Ιδιότητες της Αέριας και Στερεάς Φάσης

Μέγεθος	Τιμή	Μονάδες
$\rho_s$	1650	kg/m <sup>3</sup>
$\rho_g$	0,389	kg/m <sup>3</sup>
$\mu_g$	$3,91085 \times 10^{-5}$	kg/m/s
$u_g$	1,930374	m/s
$\epsilon_{g,max}$	0,9997	-
$\epsilon_{s,max}$	0,65	-
$\epsilon_{fr}$	0,5	-
$e_{ss}$	0,9	-
$d_p$	$9,13 \times 10^{-5}$	m
Γωνία Απόθραξης	36,03	μοίρες

#### 4.5.4. Πίεση και Θερμοκρασία Λειτουργίας

Οι πιέσεις που προκύπτουν στην κλίνη, από την επίλυση της ροής, είναι σχετικές (μανομετρικές) πιέσεις και μετρώνται ως προς την πίεση λειτουργίας (operational pressure), η οποία ορίζεται ως παράμετρος από το χρήστη.

Η αέρια φάση θεωρείται ότι συμπεριφέρεται ως ασυμπίεστο ιδανικό αέριο. Η πυκνότητα της αέριας φάσης είναι ίση με  $\rho_g = 0.389 \text{ kg/m}^3$  (Zeneli et al., 2015) και αποτελεί συνάρτηση της πίεσης λειτουργίας. Η τιμή της πίεσης αυτής επιλέχθηκε ίση με  $P_{op} = 99962 \text{ Pa}$ , προκειμένου η πυκνότητα  $\rho_g$  να προκύπτει ίση με την προαναφερθείσα τιμή. Η πυκνότητα δίνεται από τη σχέση:

$$\rho_g = \frac{P_{op}}{\frac{R}{M_w} T}, \quad \text{όπου } R = 8,314 \frac{J}{\text{mol} \cdot K} \quad (4.39)$$

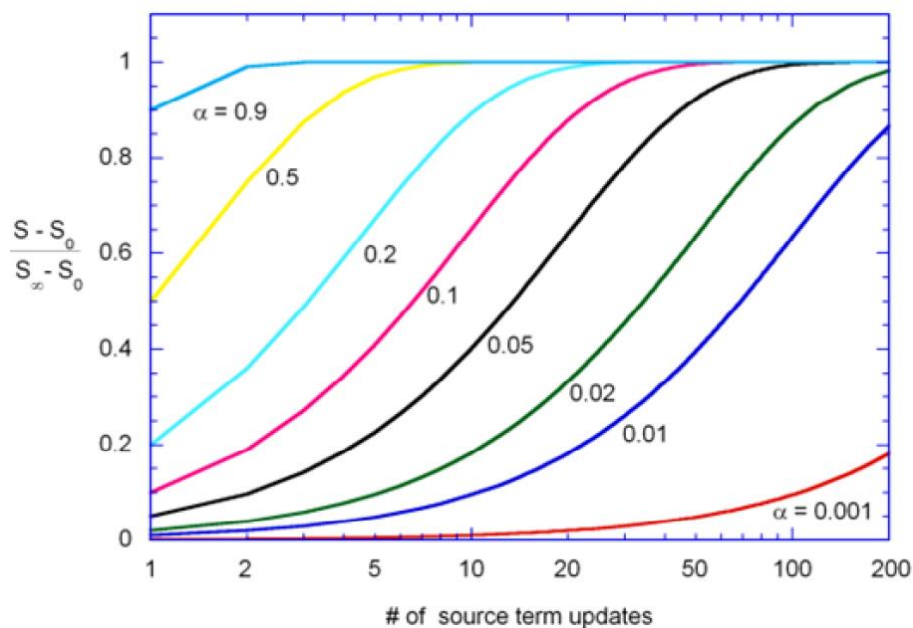
Η θερμοκρασία λειτουργίας θεωρείται σταθερή και ίση με  $T = 908 \text{ K}$  σε ολόκληρο το πεδίο ροής.

#### 4.5.5. Συντελεστές Υποχαλάρωσης (Under-relaxation Factors)

Στην επίλυση των εξισώσεων ροής χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της υποχαλάρωσης, ώστε να εξασφαλιστούν πιο ευσταθείς λύσεις. Η ευστάθεια της λύσης προκύπτει από την μείωση της νέας τιμής ενός μεγέθους κατά ένα παράγοντα. Πρέπει να σημειωθεί ότι η μέθοδος της υποχαλάρωσης δεν επηρεάζει τη τελική συγκλίνουσα λύση. Ο τρόπος λειτουργίας της μεθόδου φαίνεται στην εξής σχέση:

$$\xi_{new} = \xi_{old} + \alpha(\xi_{calculated} - \xi_{old}) \quad (4.40)$$

Στη σχέση (4.40) το «ξ» αντιπροσωπεύει το υπολογιζόμενο μέγεθος, ενώ το «α» είναι ο συντελεστής υποχαλάρωσης. Στο πίνακα της επόμενης σελίδας παρατίθενται οι συντελεστές υποχαλάρωσης που χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση της ροής, ενώ στο Σχήμα 4.2 παρουσιάζεται η επίδραση της τιμής του συντελεστή υποχαλάρωσης.



Σχήμα 4.2 Επίδραση Τιμής Συντελεστή Υποχαλάρωσης

Πίνακας 4-4 Συντελεστές Υποχαλάρωσης

Μέγεθος	Συντελεστής Υποχαλάρωσης
Πίεση	0,6
Πυκνότητα	1
Πηγές Διακριτής Φάσης	0,15
Ορμή	0,3
Κλάσμα Όγκου	0,5
Κοκκώδης Θερμοκρασία	0,2
Δυνάμεις Πεδίου	1

#### 4.6. Παραδοχές

Στις προσομοιώσεις της ροής, που έλαβαν χώρα στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής, έγιναν κάποιες παραδοχές, ώστε να απλουστευθεί το προς επίλυση πρόβλημα και να μειωθεί ο απαιτούμενος χρόνος λύσης. Οι παραδοχές αυτές παρατίθενται ακολούθως:

- i. Η κατανομή των σωματιδίων αντιπροσωπεύεται μόνο από τη μέση διάμετρο Sauter
- ii. Τα σωματίδια θεωρούνται πλήρως σφαιρικά ( $\phi = 1$ )
- iii. Στην εξίσωση κίνησης του σωματιδίου αμελούνται δυνάμεις, όπως η δύναμη επιπρόσθετης μάζας, η άντωση και η δύναμη λόγω διαφοράς πίεσης.
- iv. Η ροή θεωρείται ισοθερμοκρασιακή σε ολόκληρο το πεδίο ροής.
- v. Η ροή θεωρείται στρωτή και αμελείται η επίδραση της τύρβης.
- vi. Η κοκκώδης θερμοκρασία  $\Theta_s$  υπολογίζεται από την αλγεβρική εξίσωση (4.19), αντί της πλήρους εξίσωσης, η οποία περιγράφεται από τη μερική διαφορική (4.18).
- vii. Οι ιδιότητες της αέριας φάσης θεωρούνται ομοιόμορφες εντός του υπολογιστικού κελιού και ίσες μ' αυτές στο κέντρο του.
- viii. Δεν λαμβάνεται υπόψη η χημική αντίδραση δέσμευσης του  $\text{CO}_2$ .
- ix. Κατά την υλοποίηση του κύκλου μέσω των udf, θεωρείται ότι ο κυκλώνας είναι 100% αποτελεσματικός και δεν διαφεύγουν σωματίδια από το σύστημα.
- x. Κατά την υλοποίηση του κύκλου μέσω των udf, θεωρείται ότι ο χρόνος παραμονής των σωματιδίων στον ασβεστοποιητή (calciner) και τον κυκλώνα είναι αμελητέος.
- xi. Έχουν αμεληθεί λεπτομέρειες της γεωμετρίας της κλίνης και έχουν ληφθεί υπόψη μόνο τα βασικά στοιχεία της.

Αναφορικά, με την υπόθεση στρωτής ροής, έχει αποδειχθεί ότι η παρουσία των σωματιδίων μειώνει σημαντικά τον τυρβώδη χαρακτήρα της ροής της αέριας φάσης. Παράλληλα, η επίδραση της τύρβης είναι μικρή συγκριτικά με την επίδραση της οπισθέλκουσας δύναμης (Nikolopoulos et al., 2009), (Wang et al., 2008).





## 5. Παρουσίαση και Διερεύνηση Αποτελεσμάτων

Στο κεφάλαιο γίνεται η παρουσίαση των αποτελεσμάτων των αριθμητικών προσομοιώσεων της ρόης, που έλαβαν χώρα στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Στις προσομοιώσεις αυτές εξετάζεται η επίδραση στην υδροδυναμική συμπεριφορά της κλίνης, διαφόρων παραμέτρων. Οι παράμετροι που διερευνώνται, είναι το πλήθος των υπολογιστικών σωματιδίων (parcel), η κατανομή των σωματιδιακών όρων πηγής μέσω συντελεστών βαρύτητας, ο συντελεστής αποκατάστασης μεταξύ στερεάς φάσης και τοιχωμάτων, η οπισθέλκουσα δύναμη και τα μοντέλα της κινητικής θεωρίας των κοκκωδών ροών. Οι προσομοιώσεις της παραμετρικής ανάλυσης, μαζί με τα ειδοποιά χαρακτηριστικά τους, παρατίθενται συνοπτικά στον επόμενο πίνακα, ενώ θεωρείται ως ένα ξεχωριστό σενάριο:

Πίνακας 5-1 Αριθμητικές Προσομοιώσεις Παραμετρικής Ανάλυσης

Σενάριο	Πλήθος Parcel	Συντελεστής Βαρύτητας	$e_{sw,n}$	$e_{sw,t}$	Μοντέλο Οπισθέλκουσας	Μοντέλο KTGF	Σύντμηση
1	200000	Gaussian a=1	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	200p
2	400000	Gaussian a=1	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	400p
3	800000	Gaussian a=1	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	800p
4	400000	Nodes-per-cell	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	Nodes-per-cell
5	400000	Shortest-distance	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	Shortest-distance
6	400000	Gaussian a=0.5	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	a=0.5
7	400000	Gaussian a=2	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	a=2
8	400000	Gaussian a=6	1	1	Gidaspow	Νικολόπουλος	a=6
9	400000	Gaussian a=1	0.3	0.3	Gidaspow	Νικολόπουλος	$e_{sw}=0.3$
10	400000	Gaussian a=1	0.3	0.99	Gidaspow	Νικολόπουλος	$e_{sw}=0.3-0.99$
11	400000	Gaussian a=1	0.9	0.9	Gidaspow	Νικολόπουλος	$e_{sw}=0.9$
12	400000	Gaussian a=1	1	1	Gidaspow	Συμβατικό	KTGF
13	400000	Gaussian a=1	1	1	EMMS	Νικολόπουλος	MP-PIC EMMS

Το σενάριο 2 του προηγούμενου πίνακα αποτελεί την βασική προσομοίωση, οι παράμετροι της οποίας έχουν παρουσιαστεί αναλυτικά στο κεφάλαιο 4. Στο σενάριο αυτό, η αέρια φάση θεωρείται ότι αποτελείται μόνο από άζωτο (100% N<sub>2</sub>). Αυτή η υπόθεση αφορά και όλες τις υπόλοιπες προσομοιώσεις, με εξαίρεση αυτές που διερευνούν την επίδραση του συντελεστή βαρύτητας (Σενάρια 4-8), όπου και η αέρια φάση θεωρείται μίγμα αζώτου, οξυγόνου και διοξειδίου του άνθρακα. Όλα τα σενάρια, πλην του δεύτερου, είναι προσομοιώσεις στις οποίες έχει μεταβληθεί μία παράμετρος του βασικού σεναρίου. Εξαίρεση αποτελεί το σενάριο 12, στο οποίο έχει γίνει χρήση εναλλακτικών μοντέλων της κινητικής θεωρίας των κοκκωδών ροών.

Στα σενάρια διερεύνησης της KTGF, στο μοντέλο του Νικολόπουλου (Νικολόπουλος, 2014) η κοκκώδης πίεση δίνεται από τη σχέση (4.7) και η πίεση τριβής ισούται με τη κοκκώδη. Η κινητική, προσκρουστική, τριβική και συστολική συνεκτικότητα δίνονται από τις σχέσεις (4.12), (4.13), (4.14) και (4.17) αντίστοιχα.

Αντίθετα το συμβατικό μοντέλο, για την κοκκώδη πίεση, χρησιμοποιεί τη σχέση του Gidaspow (4.8). Η κινητική συνεκτικότητα υπολογίζεται από τη σχέση (4.15), η προσκρουστική από τη σχέση (4.13), ενώ η τριβική θεωρείται αμελητέα. Ως εκ τούτου, η πίεσης τριβής θεωρείται και αυτή αμελητέα. Σε κάθε περίπτωση πάντως και στα δύο μοντέλα η δυναμική συνεκτικότητα, προκύπτει ως το άθροισμα της κινητικής, της προσκρουστικής και της τριβικής και η κοκκώδης θερμοκρασία υπολογίζεται από την αλγεβρική εξίσωση (4.19). Τέλος, η ορθή συνεκτικότητα (συστολικό ιξώδες) του συμβατικού μοντέλου προκύπτει από το πρώτο σκέλος της σχέσης (4.17), ανεξάρτητα της τιμής του κλάσματος όγκου της στερεάς φάσης.

Στις προσομοιώσεις (σενάρια 4-8) του Πίνακα 5-1 που εξετάζουν την επίδραση της κατανομής των σωματιδιακών όρων πηγής, δεν περιλαμβάνεται ο συντελεστής βαρύτητας «αντίστροφης απόστασης» [inverse distance, σχέση (4.33)]. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι για το συγκεκριμένο συντελεστή βαρύτητας, η προσομοίωση απέκλινε μετά από λίγα δευτερόλεπτα ροής και δεν ήταν εφικτό να γίνει σύγκριση με τα υπόλοιπα σενάρια.

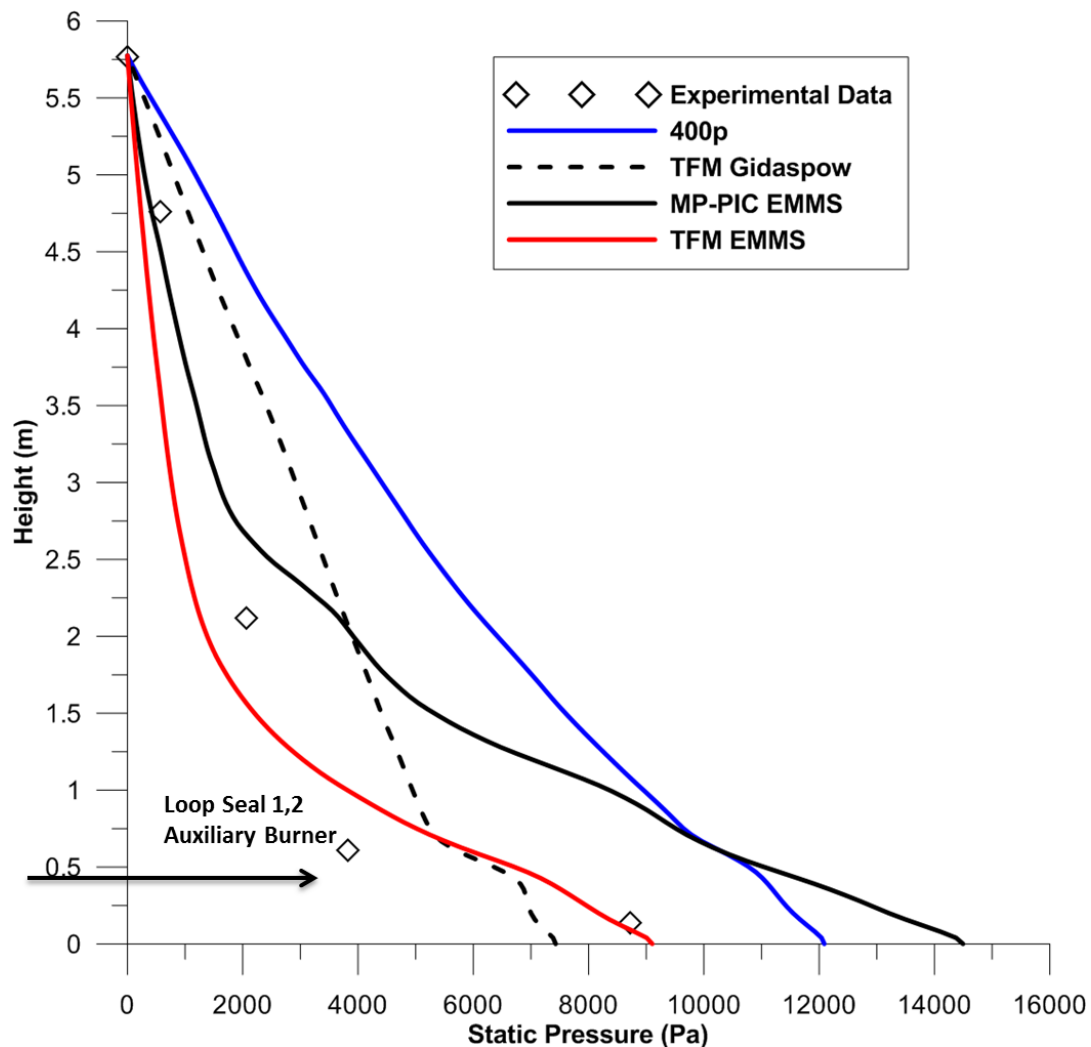
Στις ενότητες που ακολουθούν αρχικά συγκρίνονται τα αποτελέσματα των σεναρίων 2 και 13 με τα αποτελέσματα της προσέγγισης TFM για την ίδια μονάδα (Zeneli et al., 2015). Είναι σημαντικό να αναφερθεί σ' αυτό το σημείο ότι οι προσομοιώσεις με το μοντέλο TFM, αφορούν τόσο το ίδιο πλέγμα, όσο και ακριβώς το ίδιο μοντέλο οπισθέλκουσας EMMS, όπως έχει ήδη αναφερθεί ήδη στο κεφάλαιο 2. Στη συνέχεια, λαμβάνει χώρα η παρουσίαση της παραμετρικής ανάλυσης και αξιολογείται η επίδραση των διαφόρων παραμέτρων στην υδροδυναμική συμπεριφορά της κλίνης.

### **5.1. Σύγκριση Αποτελεσμάτων TFM, MP-PIC και Μοντέλων Οπισθέλκουσας Δύναμης**

Στο διάγραμμα της επόμενης σελίδας παρουσιάζεται η καθ' ύψος χρονικά μέση στατική πίεση στο κέντρο της κλίνης και συγκρίνονται τα μοντέλα οπισθέλκουσας Gidaspow και EMMS, τόσο για την προσέγγιση TFM, όσο και για την MP-PIC. Πρέπει να σημειωθεί ότι, στο διάγραμμα αυτό χρησιμοποιείται ως πίεση αναφοράς, η πειραματική μέτρηση για τη πίεση στο ύψος  $z = 5,768$  m της κλίνης. Επίσης, το διάγραμμα της κατανομής της πίεσης είναι ένα εξαιρετικά αποτελεσματικό εργαλείο για την εξαγωγή συμπερασμάτων, σχετικά με την ακρίβεια των προσομοιώσεων, καθότι υπάρχουν διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα, για την πίεση στη κλίση. Ως εκ τούτου η σύγκριση με τις πειραματικές μετρήσεις αποτελεί το καλύτερο κριτήριο για την ακρίβεια των υπό εξέταση μοντέλων. Ταυτόχρονα, το διάγραμμα αυτό υποδεικνύει ευθέως την κατανομή μάζας της στερεάς φάσης στη μονάδα.

Από το διάγραμμα είναι εμφανές ότι το μοντέλο που αναπτύχθηκε φαίνεται να υπεκτιμά την πτώση πίεσης σε σχέση με τη μέθοδο TFM. Το μοντέλο EMMS με εφαρμογή στην προσέγγιση TFM είναι το συνολικά πιο συνεπές με τις πειραματικές μετρήσεις, ενώ παράλληλα είναι το μοναδικό μοντέλο που υποεκτιμά την πίεση κατά κύριο λόγο. Όσον αφορά την ακρίβεια, εξαίρεση, από τα προαναφερθέντα, αποτελεί η

εφαρμογή του μοντέλου EMMS στην περίπτωση περιγραφής κατά Lagrange, όπου για ύψη μεγαλύτερα των 2,5 μέτρων διαθέτει την καμπύλη με τη μεγαλύτερη ακρίβεια. Αντίθετα, όμως, για μικρότερα ύψη, η υπερεκτίμηση και απόκλιση της υπολογιζόμενης πίεσης από τις πειραματικές τιμές της, αυξάνεται δραματικά και ειδικά, για ύψη μικρότερα του μισού μέτρου, δίνει τα λιγότερο ακριβή αποτελέσματα.

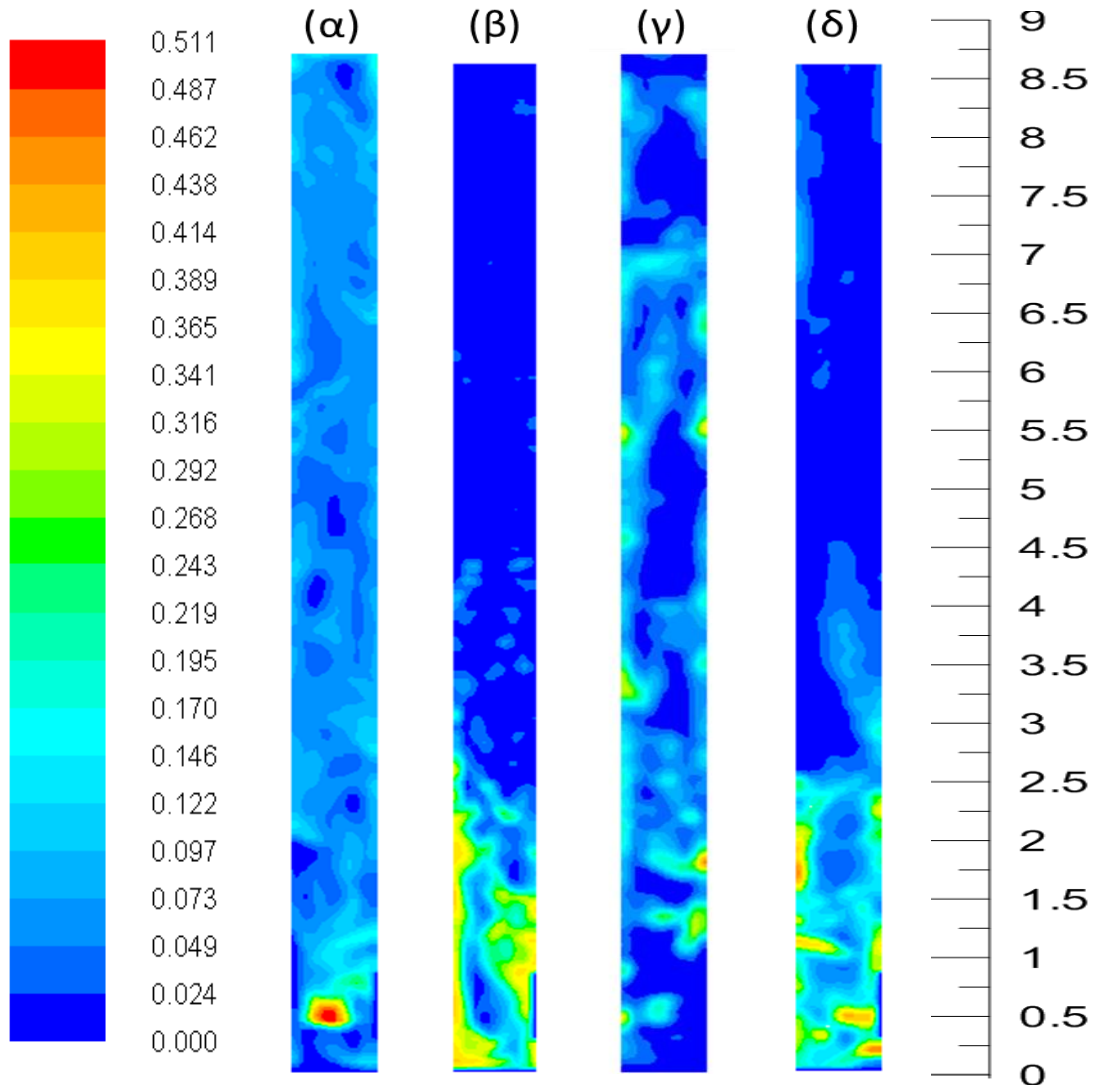


Σχήμα 5.1 Χρονικά Μέση Στατική Πίεση κατά Μήκος του Άξονα Συμμετρίας της Κλίνης

Οι αποκλίσεις από τα πειραματικά δεδομένα στην περιοχή γύρω από το ύψος  $z = 0.5$  m, σχετίζονται με την ανακυκλοφορία των σωματιδίων, τα οποία επιστρέφουν στην κλίνη από το loop seal 1 το οποίο βρίσκεται σ' αυτό το ύψος μαζί με το loop seal 2 και τον αγωγό του βοηθητικού καυστήρα. Είναι ουσιώδες να αναφερθεί ότι αυτές οι τοπικές αποκλίσεις οφείλονται σε μεγάλο βαθμό στην προσομοίωση της ροής μονάχα του ενανθρακωτή και όχι ολόκληρης της εγκατάστασης, έχοντας ως συνέπεια να μην λαμβάνεται υπόψη η επίδραση του υπόλοιπου συστήματος, παρά μόνο ως επιβαλλόμενων οριακών συνθηκών. Τυχόν προσομοίωση της ροής σε ολόκληρη τον κύκλο CaO/CaCO<sub>3</sub> αναμένεται να μειώσει αυτές τις αποκλίσεις (Zeneli et al., 2015).

Αναφορικά με το μοντέλο του Gidaspow η εφαρμογή του στην μέθοδο TFM δίνει καλύτερα αποτελέσματα από την αντίστοιχη για τη προσέγγιση κατά Lagrange σε

ολόκληρο το εύρος τιμών. Παράλληλα και οι δύο καμπύλες εμφανίζουν μια σχεδόν γραμμική συμπεριφορά κα εξάρτηση μεταξύ της στατικής πίεσης και του ύψους. Η γραμμικότητα αυτή ουσιαστικά μας οδηγεί στο συμπέρασμα της ομοιόμορφης κατανομής των σωματιδίων σε ολόκληρο το ύψος του αγωγού ανόδου (riser).



Σχήμα 5.2 Στιγμιαία Κλάσματα Όγκου της Στερεάς Φάσης στην επιφάνεια  $Y=0$   
Περιπτώσεις: α) TFM Gidaspow, β) TFM EMMS γ) 400p δ) MP-PIC EMMS

Η ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων στην κλίνη που προκύπτει με βάση το μοντέλο του Gidaspow φαίνεται χαρακτηριστικά στο προηγούμενο Σχήμα 5.2. Στο σχήμα αυτό παρουσιάζεται το στιγμιαίο κλάσμα όγκου της στερεάς φάσης για τις τέσσερις αντίστοιχες προσομοιώσεις του σχήματος Σχήμα 5.1. Τόσο για την μέθοδο TFM όσο και για την MP-PIC, το μοντέλο δίνει ομοιομορφία στην κατανομή, με πιο εμφανή αυτή στην περίπτωση της προσομοίωσης των δύο συνεχών φάσεων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, να μην προβλέπεται σωστά το κλάσμα όγκου στην περιοχή γύρω από τον πυθμένα και να μην υπάρχει εμφανής διάκριση μεταξύ πυκνών (dense) και αραιών (dilute) περιοχών στην κλίνη. Αυτό οφείλεται στην αδυναμία του μοντέλου

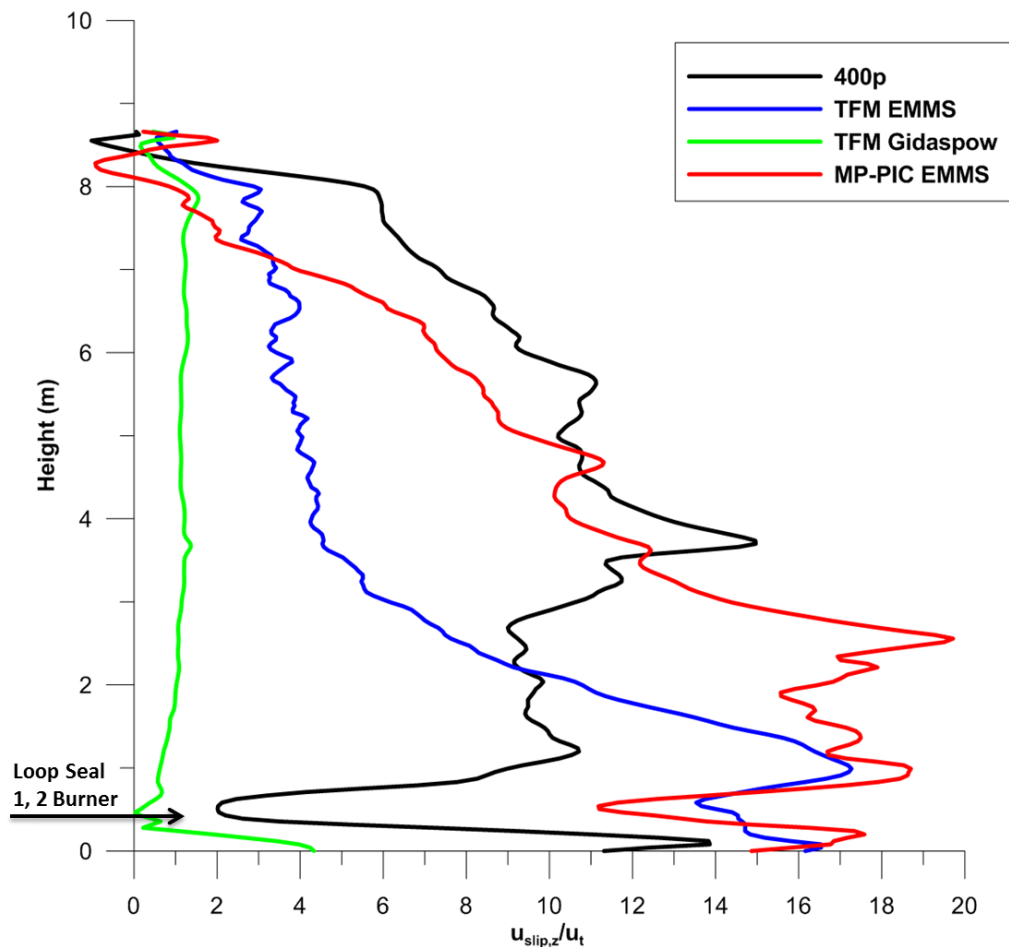
να προβλέπει τις πολύπλοκες δομές που σχηματίζουν τα σωματίδια, ειδικά στο χαμηλότερο τμήμα της κλίνης (bottom zone).

Αντίθετα, στις περιπτώσεις εφαρμογής του μοντέλου οπισθέλκουσας EMMS, είναι ιδιαίτερος εμφανής η πρόβλεψη από το μοντέλο του σχηματισμού συμπλεγμάτων (clusters) μεταξύ των σωματιδίων. Στο χαμηλό τμήμα της κλίνης (πυθμένας) προβλέπεται σωστά υψηλή συγκέντρωση μάζας της στερεάς φάσης, ιδίως περιφερειακά του άξονα συμμετρίας της κλίνης γύρω από τα τοιχώματα. Διακριτές, επιπλέον, είναι η περιοχή χαμηλών κλασμάτων όγκου (freeboard), που βρίσκεται στο άνω τμήμα της κλίνης και καταλαμβάνει το μεγαλύτερο τμήμα της, καθώς και η ενδιάμεση ζώνη (splash zone) μεταξύ των δύο προαναφερθέντων περιοχών, η οποία λειτουργεί ως ενδιάμεσος κρίκος τους. Αναφορικά, με τα τμήματα της κλίνης που καλύπτουν οι προηγούμενες τρεις περιοχές, ο πυθμένας (bottom zone) φτάνει μέχρι το ύψος του 1,5 m περίπου, η ενδιάμεση ζώνη εκτείνεται έως το ύψος των 3,5 m περίπου και στο υπόλοιπο τμήμα της κλίνης βρίσκεται το freeboard.

Πρέπει να σημειωθεί σ' αυτό το σημείο ότι στις παρατηρούμενες διαφορές μεταξύ των αντίστοιχων προσομοιώσεων TFM και MP-PIC πρέπει να ληφθεί υπόψη ότι έγινε χρήση διαφορετικών μοντέλων της κινητικής θεωρίας των κοκκωδών ροών, σε μεγέθη όπως η κοκκώδης πίεση, η κινητική συνεκτικότητα κ.ο.κ. Αυτό είναι σημαντικό να τονιστεί, ειδικά μάλιστα μπορεί να οδηγήσει στην εξαγωγή λανθασμένων συμπερασμάτων.

Για περαιτέρω επαλήθευση και εξακρίβωση των προηγούμενων παρατηρήσεων, γίνεται χρήση της κατανομής της χρονικά μέσης ταχύτητας ολίσθησης  $u_{slip,z}$  στο κέντρο του αγωγού ανόδου (riser) κατά μήκος τους κατακόρυφου άξονα. Η ταχύτητα ολίσθησης εξαρτάται από την σωματιδιακή κατανομή στον χώρο και είναι ανάλογη αυτής, υπό την προϋπόθεση ότι έχει επέλθει υδροδυναμική ισορροπία μεταξύ των φάσεων. Αυτό σημαίνει ότι σε περιοχές υψηλών κλασμάτων όγκου  $\epsilon_s$ , η τιμή της είναι αντίστοιχα υψηλή, ενώ αντιστρόφως παρατηρούνται χαμηλές τιμές της ταχύτητας αυτής σε περιοχές υψηλών συγκεντρώσεων της στερεάς φάσης. Η τιμή της ταχύτητας ολίσθησης έχει, ακόμα, ιδιαίτερο ενδιαφέρον συγκρινόμενη με την τερματική ταχύτητα  $u_t$  των σωματιδίων.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί στην υποενότητα 2.1.6 του κεφαλαίου 2, η τερματική ταχύτητα ορίζεται ως η ταχύτητα ολίσθησης, για την οποία η συνισταμένη των δυνάμεων κατά την κάθετη διεύθυνση πάνω στο σωματίδιο είναι ίση με μηδέν, ενώ παράλληλα αυτό δεν επηρεάζεται από την παρουσία των γειτονικών του σωματιδίων. Αυτό, με άλλα λόγια, σημαίνει ότι επάνω στο σωματίδιο επιδρούν μονάχα οι δυνάμεις της οπισθέλκουσας, της άνωσης και της βαρύτητας. Η τερματική ταχύτητα προκύπτει με εφαρμογή των σχέσεων (2.10), (2.11) και (2.12). Για λόγους συμφωνίας με τις προλέξεις της μεθόδου TFM των (Zeneli et al., 2015), η τερματική ταχύτητα υπολογίστηκε για τιμή σφαιρικότητας ίσης με  $\phi=0,8$ , αντί της τιμής  $\phi=1$  που έπρεπε να χρησιμοποιηθεί λόγω της υπόθεσης πλήρους σφαιρικότητας της μεθόδου MP-PIC. Ως εκ τούτου, η τερματική ταχύτητα προκύπτει περίπου ίση με  $u_t \approx 0.1754$  m/s.



Σχήμα 5.3 Χρονικά Μέση Ταχύτητα Ολίσθησης κατά τη Διεύθυνση z

Η φυσική σημασία του αδιάστατου λόγου  $u_{slip,z}/u_t$  στο Σχήμα 5.3 είναι ότι για τιμές πλησίον της μονάδας σημαίνει ότι το σωματίδιο βρίσκεται σε περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης μάζας της στερεάς φάσης και κινείται ελεύθερα χωρίς κρούσεις. Μεγαλύτερες τιμές του αδιάστατου λόγου συνεπάγονται την παρουσία υψηλών κλασμάτων όγκου, εκ μέρους της στερεάς φάσης και τον σχηματισμό συμπλεγμάτων μεταξύ των σωματιδίων, προσφέροντας κατάλληλες συνθήκες για την ανάπτυξη μεγάλων ταχυτήτων ολίσθησης (Zeneli et al., 2015).

Στο Σχήμα 5.3 είναι φανερό ότι οι προσομοιώσεις TFM παίρνουν τιμές στο μεγαλύτερο μέρος τους κοντά στην μονάδα. Για το μοντέλο Gidaspow, οι τιμές πλησιάζουν την μονάδα σε ολόκληρο το ύψος της κλίνης, με εξαίρεση μονάχα μια πολύ μικρή περιοχή στον πυθμένα ( $z < 0,5$  m), επαληθεύοντας ουσιαστικά την παρατήρηση για σχεδόν ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων σε όλο το πεδίο ροής. Αντίθετα, το μοντέλο του EMMS, παράγει σε όλο το εύρος τιμών μεγαλύτερους λόγους ταχυτήτων, όμως παρ' όλα αυτά διατηρεί χαμηλές τιμές για την περιοχή του freeboard. Σε μικρά ύψη ( $z < 3$  m) όμως, οι τιμές του λόγου αυξάνονται επιβεβαιώνοντας την παρουσία αυξημένης παρουσίας της στερεάς φάσης στον πυθμένα της κλίνης. Η μέγιστη τιμή του λόγου, για την περίπτωση του EMMS, εμφανίζεται σε ύψος ένα μέτρο, δηλαδή λίγο πιο πάνω από την είσοδο των σωματιδίων, που προέρχονται από το σύστημα της ανακυκλοφορίας. Παράλληλα

στην περιοχή αυτή εμφανίζει μια έντονη διακύμανση, η οποία είναι άμεσα σχετιζόμενη με την επιβολή των οριακών συνθηκών των στεγανοποιητών ανακυκλοφορίας (loop seal) και του βοηθητικού καυστήρα (auxiliary burner), καθώς φυσικά και της ανακυκλοφορίας των στερεάς φάσης.

Αυτό που έχει ιδιαίτερη σημασία και προκύπτει από την κατανομή της ταχύτητας ολίσθησης είναι ότι οι προσομοιώσεις της περιγραφής κατά Lagrange, δεν ακολουθούν αντίστοιχη πορεία με τις αντίστοιχες προσομοιώσεις της περιγραφής κατά Euler. Το μοντέλο του Gidasrow προβλέπει υψηλές τιμές της ταχύτητας ολίσθησης σε σχεδόν ολόκληρη την έκταση της κλίνης, δηλώνοντας ουσιαστικά την παρουσία πυκνών περιοχών σε ολόκληρη την κλίση. Αυτό το συμπέρασμα έρχεται σε ευθεία αντίθεση με τα συμπεράσματα που προέκυψαν από την εξέταση του στιγμιαίου κλάσματος όγκου στο επίπεδο  $Y=0$ , το οποίο παρουσίαζε μια αραιή περιοχή σε όλο το φάσμα του πεδίου ροής. Σχετικά με την καμπύλη του Gidasrow, είναι χαρακτηριστικό ότι η υψηλότερη τιμή του λόγου των ταχυτήτων παρουσιάζεται σε ύψος περίπου τεσσάρων μέτρων ( $z \approx 4$  m). Παράλληλα, στον πυθμένα της κλίνης παρουσιάζει μια τεράστια διακύμανση, εμφανίζοντας στο ύψος της εισόδου των σωματιδίων ελάχιστη τιμή πλησίον της μονάδας.

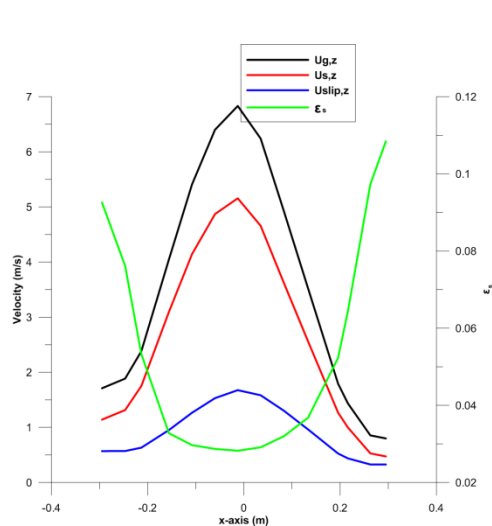
Παράλληλα, στην περίπτωση των Lagrange, παρατηρείται μια επιπλέον ασυμβατότητα σε σχέση με τις προσομοιώσεις Euler. Όπως ήδη έχει αναφερθεί, το μοντέλο EMMS προβλέπει συνεχώς μεγαλύτερες τιμές του λόγου έναντι του συμβατικού μοντέλου στην μέθοδο. Στη μέθοδο MP-PIC ωστόσο, αυτό ισχύει μόνο για τον πυθμένα και την ενδιάμεση ζώνη, ενώ στην περιοχή του freeboard η τάση αυτή αντιστρέφεται.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός, ότι το συγκεκριμένο μοτίβο της έντονης διακύμανσης σ' αυτό το ύψος το παρουσιάζει τόσο η προσομοίωση της μεθόδου TFM με το EMMS, όσο και αυτή της αντίστοιχης MP-PIC. Το γεγονός αυτό ενισχύει τον ισχυρισμό για την ουσιαστική επίδραση της επιβολής των οριακών συνθηκών στο ύψος αυτό.

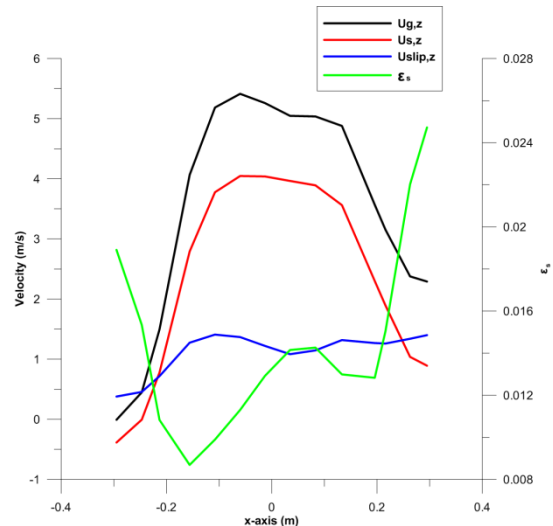
Η εφαρμογή του μοντέλου EMMS στην προσέγγιση κατά Lagrange δίνει παρόμοια αποτελέσματα μ' αυτά του Gidasrow, για τη περίπτωση του MP-PIC. Ο λόγος της ταχύτητας ολίσθησης προς τη τερματική ταχύτητα εμφανίζει τιμές μεγαλύτερες της μονάδας σχεδόν σε ολόκληρο το πεδίο. Στην περιοχή του freeboard προβλέπει χαμηλότερες τιμές από αυτές του συμβατικού μοντέλου, αλλά αυτή η τάση αντιστρέφεται στις περιοχές του πυθμένα και της ενδιάμεσης ζώνης (splash zone), με τη ταχύτητα ολίσθησης να προκύπτει ακόμα και 20 φορές μεγαλύτερη της τερματικής.

Ένα κοινό χαρακτηριστικό στοιχείο των δύο προσομοιώσεων κατά Lagrange, είναι η παρουσία, σε αντίθεση με τις προσομοιώσεις κατά Euler, αρνητικών ταχυτήτων ολίσθησης στην περιοχή της εξόδου από την κλίση. Δηλαδή στην περιοχή της εξόδου παρατηρούνται ταχύτητες της στερεάς φάσης, οι οποίες είναι μεγαλύτερες αυτών της

αέριας φάσης. Το φαινόμενο οφείλεται στην αδράνεια της στερεάς φάσης, η οποία είναι συγκριτικά, μ' αυτή της αέριας, πολύ μεγαλύτερη. Η διαφορά αυτή στην αδράνεια, έχει ως συνέπεια τα σωματίδια να μην μπορούν να ακολουθήσουν την πορεία της αέριας φάσης που κινείται με κατεύθυνση προς την οριζόντια έξοδο (το αέριο στρίβει και αλλάζει κατεύθυνση), με την κύρια συνιστώσα της ταχύτητάς τους να είναι κατά την κατακόρυφη διεύθυνση. Επομένως, στο τμήμα αυτό της κλίνης τα σωματίδια διαχωρίζονται μερικώς από την αέρια φάση.



Σχήμα 5.4 Χρονικά Μέση Κατανομή Ταχυτήτων κατά τη z Διεύθυνση και Κλάσματος Όγκου στον Άξονα x για z=6 m για το 400p



Σχήμα 5.5 Χρονικά Μέση Κατανομή Ταχυτήτων κατά τη z Διεύθυνση και Κλάσματος Όγκου στον Άξονα x για z=6 m για το MP-PIC EMMS

Η περαιτέρω διερεύνηση των ταχυτήτων που προβλέπουν οι προσομοιώσεις με τη μέθοδο MP-PIC, γίνεται με εξέτασή τους στην περιοχή του freeboard. Έτσι, στα σχήματα Σχήμα 5.4 Σχήμα 5.5 παρουσιάζονται οι κατανομές των αντίστοιχων ταχυτήτων της αέριας και της στερεάς φάσης κατά την κατακόρυφη διεύθυνση για τις δύο προσομοιώσεις, καθώς και το κλάσμα όγκου  $\epsilon_s$  σε ύψος z=6 m κατά μήκος της διεύθυνσης y=0.

Από τα δύο προηγούμενα διαγράμματα προκύπτει ότι και τα δύο μοντέλα οπισθέλκουσας προβλέπουν σε γενικές γραμμές παρόμοια συμπεριφορά. Συγκεκριμένα και τα δύο μοντέλα προλέγουν μια σχεδόν παραβολική κατανομή του κλάσματος όγκου της στερεάς φάσης, επαληθεύοντας, πάντα ποιοτικά, το πρότυπο ροής core-annulus.

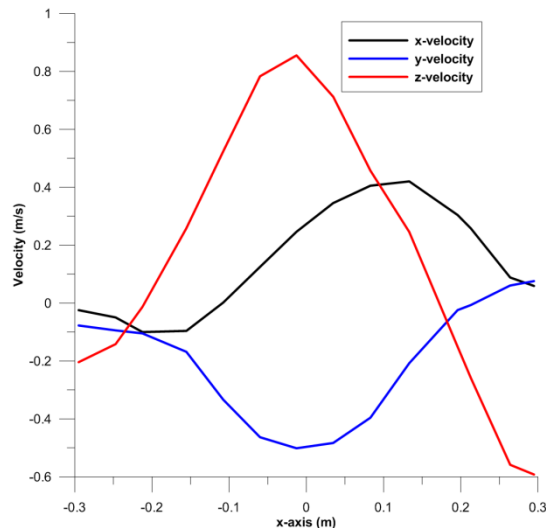
Το πρότυπο αυτό ροής είναι χαρακτηριστικό στις ροές σε ρευστοποιημένες κλίνες ανακυκλοφορίας και φέρει το όνομα του εξαιτίας των δύο διακριτών περιοχών που χαρακτηρίζουν την κύρια ροή των σωματιδίων. Ειδικότερα, γύρω από κέντρο της κλίνης (πυρήνας-core) παρατηρείται μια κατακόρυφη και ανοδική αραιή ροή σωματιδίων, ενώ περιφερειακά αυτής, σχηματίζοντας ένα δακτύλιο (annulus), παρατηρείται μια πυκνή καθοδική πορεία των σωματιδίων. Παράλληλα, στην περιοχή



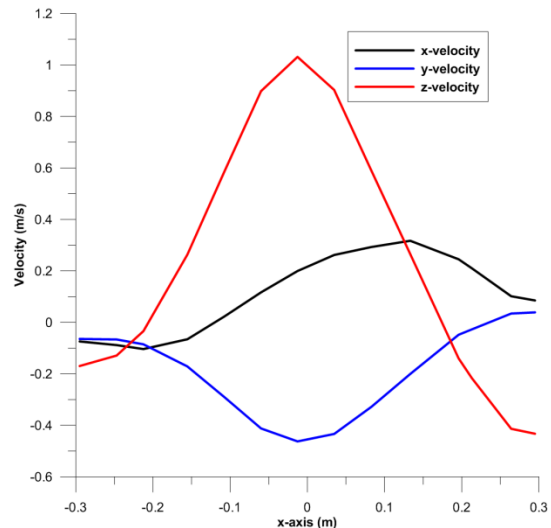
του πυρήνα τα σωματίδια λαμβάνουν υψηλές κατά μέτρο ταχύτητες σε σχέση μ' αυτά του δακτυλίου.

Επιστρέφοντας στην εξέταση των σχημάτων, και στις δύο περιπτώσεις προβλέπονται χαμηλές συγκεντρώσεις της στερεάς φάσης στην περιοχή του πυρήνα, μαζί με υψηλές ταχύτητας της αέριας και στερεάς φάσης. Αντιθέτως, γύρω από τα τοιχώματα προκύπτουν ορθά υψηλότερα κλάσματα όγκου και σημαντικά χαμηλότερες ταχύτητες για τις δύο φάσεις. Ωστόσο, με εξαίρεση την περιοχή των τοιχωμάτων στα αρνητικά του άξονα x στη περίπτωση του EMMS, κανένα μοντέλο δεν προβλέπει αρνητικές τιμές, δηλαδή καθοδική πορεία, για τις ταχύτητες τόσο του αερίου όσο και των σωματιδίων. Αυτό, πρακτικά, δηλώνει ότι ίσως δεν προβλέπεται ορθά το ροϊκό φαινόμενο του core-annulus. Είναι ενδιαφέρον πως ενώ η κατανομή του κλάσματος όγκου παρομοιάζει τη τυπική κατανομή του core-annulus, το ίδιο δε παρατηρείται με τις ταχύτητες.

Πέραν, των βασικών ομοιοτήτων μεταξύ των δύο περιπτώσεων, διακρίνονται και αρκετές διαφορές. Συγκεκριμένα το μοντέλο EMMS προσομοιώνει με μεγαλύτερη ακρίβεια τη ροή, καθότι προβλέπει μεγαλύτερο εύρος τιμών για τις ταχύτητες και μεγαλύτερη επιφάνεια για το πυρήνα. Από την άλλη πλευρά, το συμβατικό μοντέλο προλέγει σημαντικά χαμηλότερες τιμές για το κλάσμα όγκου σε ολόκληρο τον άξονα x. Τέλος, και τα δύο σχήματα συμφωνούν με το σχήμα Σχήμα 5.3, αφού η ταχύτητα ολίσθησης είναι σχεδόν εξολοκλήρου μια τάξη μεγαλύτερη της τερματικής.



Σχήμα 5.6 Χρονικά Μέση Κατανομή Συνιστωσών Ταχυτήτων της Αέριας Φάσης κατά τον Άξονα x για  $z=8.553$  m για το σενάριο 400p



Σχήμα 5.7 Χρονικά Μέση Κατανομή Συνιστωσών Ταχυτήτων της Στερεάς Φάσης κατά τον Άξονα x για  $z=8.553$  m για το σενάριο 400p

Στις διαφορές συγκαταλέγεται, επίσης, η πρόβλεψη γενικά υψηλότερων ταχυτήτων στις ίδιες θέσεις από το ομογενές μοντέλο. Ταυτόχρονα, το τελευταίο μοντέλο ουσιαστικά προβλέπει ένα συμμετρικό προφίλ ταχυτήτων και φαίνεται να μην επηρεάζεται από την έξοδο της κλίνης. Η ασύμμετρη τοπόθετηση της εξόδου στα

θετικά του άξονα x αναμένεται να προκαλεί ασυμμετρίες στο πεδίο ροής. Αντιθέτως, στο μοντέλο EMMS παρατηρείται ένα ασύμμετρο προφίλ προλέγοντας μεγαλύτερες ταχύτητες και χαμηλότερα κλάσματα όγκου στην απέναντι πλευρά από αυτή της εξόδου.

Λόγω της πρόβλεψης αρνητικών ταχυτήτων ολίσθησης στη περιγραφή κατά Lagrange, παρουσιάζονται τα προφίλ των ταχυτήτων στο ύψος  $z=8.553$  m, για το συμβατικό μοντέλο, της αέριας και της στερεάς φάσης στα σχήματα Σχήμα 5.6 και Σχήμα 5.7 αντίστοιχα. Στο ύψος αυτό παρατηρείται η μικρότερη (αρνητική) τιμή της ταχύτητας ολίσθησης στη περίπτωση του ομογενούς μοντέλου. Στα διαγράμματα αυτά, είναι εμφανής η υψηλότερη τιμή των ταχυτήτων των σωματιδίων κατά την κατακόρυφη διεύθυνση, στις οποίες οφείλονται οι αρνητικές ταχύτητες ολίσθησης. Παράλληλα, διαπιστώνονται εύκολα οι μεγαλύτερες ταχύτητες του αερίου κατά τη διεύθυνση x στα θετικά (θέση εξόδου) του άξονα x. Οι αυξημένες αυτές τιμές ουσιαστικά δηλώνουν την παραπάνω παρατήρηση για αλλαγή κατεύθυνσης του αερίου και για μερικό διαχωρισμό των δύο φάσεων.

Χαρακτηριστικός Αριθμός Κελιού	Συντεταγμένες Κελιού			Πλήθος parcel	Λόγοι Συνιστωσών Δυνάμεων		
	Διεύθυνση x (m)	Διεύθυνση y (m)	Διεύθυνση z (m)		R <sub>x</sub>	R <sub>y</sub>	R <sub>z</sub>
10990	0,013893	0,048345	0,336299	104	0,368493	0,91366	1,000033
12101	-0,020170	-0,278159	0,260038	2	1,078945	1,089843	1,000105
9199	0,055913	0,045537	0,97074	53	0,606153	0,698290	1,001060
6634	0,014574	-0,22235	1	80	0,386098	0,387032	1,000991
26886	-0,042468	0,044675	5,94433	11	0,286181	0,286316	1,018182
20017	0,019275	-0,270058	6,019887	21	0,559393	0,552794	1,019200
10861	-0,035524	0,047168	0,298806	92	0,628394	0,657306	1,027819
12103	0,059314	-0,263655	0,260041	189	0,846677	0,848383	1,004524
6506	0,058722	0,001869	1,011433	22	0,836569	1,172521	1,008602
6542	-0,021875	-0,272727	1,052909	49	0,162919	0,164213	2,108411
26442	0,058715	0,001864	6,057997	9	0,414776	0,480728	1,055295
19892	-0,059376	-0,273467	5,982108	6	0,583841	0,79063	1,035181

Πίνακας 5-2 Λόγοι Συνιστωσών Οπισθελκουσών Δυνάμεων

Με αφορμή την επιβεβαίωση, σύμφωνα με τη μέχρι τώρα ανάλυση, του καθοριστικού ρόλου του μοντέλου της οπισθέλκουσας κρίθηκε σκόπιμη η βαθύτερη εξέταση της δύναμης αυτής. Η διερεύνηση αυτή, έλαβε χώρα και για τα δύο μοντέλα οπισθέλκουσας. Για το σκοπό αυτό εκπονήθηκαν κατάλληλοι κώδικες σε FORTRAN, οι οποίοι υπολογίζουν την προβλεπόμενη οπισθέλκουσα από το μοντέλο του Gidaspow και του EMMS αντίστοιχα. Στους κώδικες αυτούς η οπισθέλκουσα υπολογίζεται με δύο τρόπους. Αρχικά, εφαρμόζοντας τη σχέση (3.6) της περιγραφής κατά Lagrange και στη συνέχεια οσάν να ήταν συνεχές μέσο η στερεά φάση, με εφαρμογή του όρου για την οπισθέλκουσα της εξίσωσης (3.3). Στη συνέχεια, υπολογίζεται οι λόγοι των δύο δυνάμεων κατά συνιστώσα. Ειδικότερα, για συγκεκριμένους όγκους ελέγχου (υπολογιστικά κελιά) του πλέγματος, εντοπίστηκαν τα parcel που ανήκουν σ' αυτόν, σε μία χρονική στιγμή ( $t=25$  sec). Για την εύρεση των parcel αυτών και των αντίστοιχων ιδιοτήτων τους, έγινε εφαρμογή κατάλληλου UDF, που υλοποιήθηκε στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Η εύρεση του λόγου των δυνάμεων αυτών, για το ίδιο μοντέλο οπισθέλκουσας, παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον καθότι ο όρος της οπισθέλκουσας, στις εξισώσεις για τη στερεά φάση, έχει διαφορετική μορφή στις δύο μεθόδους [βλ. εξισώσεις (3.4), (3.5) και (3.6)]. Στον Πίνακα 5-2 παρατίθενται τα αποτελέσματα της υπόψη ανάλυσης, όπου με το σύμβολο  $R_i$  ( $i=x, y, z$ ) αναπαριστάται ο λόγος των δυνάμεων (δύναμη περιγραφής κατά Lagrange προς την αντίστοιχη δύναμη κατά Euler). Ταυτόχρονα, τα πρώτα 6 υπολογιστικά κελιά αφορούν τη περίπτωση εφαρμογής του μοντέλου του Gidasrow, ενώ τα υπόλοιπα 6 αφορούν το μοντέλο EMMS.

Σύμφωνα με τον Πίνακα 5-2, για την περίπτωση του Gidasrow προκύπτει ότι στην κατακόρυφη διεύθυνση, το μοντέλο προβλέπει σχεδόν ίσου μέτρου δυνάμεις. Το αντίστοιχο όμως δεν μπορεί να ειπωθεί για τις άλλες δύο διευθύνσεις του χώρου. Οι αποκλίσεις του λόγου από την μονάδα είναι προφανείς, οδηγώντας στο συμπέρασμα της ανισοτροπίας μεταξύ των τριών διευθύνσεων. Ωστόσο, με εξαίρεση, τη περίπτωση του πρώτου κελιού προκύπτει ισοτροπία μεταξύ των διευθύνσεων  $x$  και  $y$ . Η ισοτροπία αυτή που παρατηρείται είναι πιθανό να οφείλεται στη γεωμετρία της κλίνης και συγκεκριμένα στην κυλινδρική διατομή της. Παράλληλα, στη μέθοδο MP-PIC προλέγεται συστηματικά μεγαλύτερη οπισθέλκουσα κατά την κατακόρυφη έναντι της αντίστοιχης στην TFM. Το πρώτο κελί βρίσκεται στο κέντρο της κλίνης στην περιοχή του πυθμένα, όπου με βάση το Σχήμα 5.10, αναπτύσσονται υψηλά κλάσματα όγκου. Επειδή, στο ύψος των κελιών αυτών πραγματοποιείται η εισαγωγή των δευτερευόντων ρευμάτων αέρα, το πεδίο ροής δεν έχει διαμορφωθεί ακόμα και συνεπώς δεν μπορεί να συγκριθεί με τα υπόλοιπα κελιά, που εντοπίζονται στην ενδιάμεση ζώνη και το freeboard.

Στη περίπτωση του EMMS σε γενικές γραμμές ακολουθούνται οι ίδιες τάσεις, μ' αυτές που περιγράφηκαν στο Gidasrow. Εξακολουθεί να παρατηρείται ισοτροπία μεταξύ των διευθύνσεων  $x$  και  $y$ , με εξαίρεση το κελί 6506, όπου παρατηρούνται σημαντικές αποκλίσεις, αλλά οι τιμές των λόγων απέχουν σημαντικά από την μονάδα. Όσον αφορά την κατακόρυφη διεύθυνση σε όλα τα κελιά, πλην του 6542, ο λόγος παίρνει τιμές πλησίον της μονάδας. Στο κελί 6542 ο λόγος ταχυτήτων κατά τη  $z$  διεύθυνση είναι μεγαλύτερος του 2. Αυτό σημαίνει ότι στη μέθοδο Lagrange προβλέπεται διπλάσια δύναμη οπισθέλκουσας. Το κελί αυτό, όμως αποτελεί ιδιαίτερη περίπτωση, στην οποία εμφανίζονται τόσο αρνητικές όσο και θετικές ταχύτητες ολίσθησης, σχηματίζοντας ένα ανομοιόμορφο πεδίο στον όγκο ελέγχου και για το λόγο αυτό φαίνεται να αποτελεί εξαίρεση.

Σ' αυτό το σημείο κρίνεται απαραίτητο να τονιστεί, ότι οι παραπάνω παρατηρήσεις δεν μπορούν να έχουν γενικό χαρακτήρα. Το δείγμα που εξετάστηκε θεωρείται πολύ μικρό και συνεπώς δεν μπορούν να εξαχθούν ασφαλή και γενικά συμπεράσματα για το μοτίβο που ακολουθείται.

## 5.2. Παραμετρική Ανάλυση

### 5.2.1. Πλήθος Υπολογιστικών Σωματιδίων (Parcel)

Στην υποενότητα αυτή εξετάζεται η επίδραση του αριθμού των υπολογιστικών σωματιδίων, με τα οποία μοντελοποιείται η στερεά φάση. Τα υπό διερεύνηση σενάρια είναι τα τρία πρώτα του Πίνακα 5-1, που αναπαριστούν με 200, 400 και 800 χιλιάδες parcel αντίστοιχα, τη στερεά φάση. Το πλήθος των σωματιδίων, μέσω των οποίων γίνεται η μοντελοποίηση της στερεάς φάσης, αποτελεί κρίσιμη παράμετρο στην μέθοδο MP-PIC και σε όλες τις προσεγγίσεις Euler-Lagrange γενικότερα, διότι είναι άμεση συνάρτηση του πλήθους των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν την στερεά φάση [βλ. Εξισώσεις (3.8) και (3.9)].

Ως μέθοδος δημιουργίας (parcel release method) των υπολογιστικών σωματιδίων έχει επιλεγεί αυτή της σταθερής μάζας (constant mass) για όλα τα υπ' όψη σενάρια. Στον ακόλουθο πίνακα παρατίθενται οι μάζες των υπολογιστικών σωματιδίων για κάθε σενάριο ξεχωριστά.

Πίνακας 5-3 Μάζα Υπολογιστικού Σωματιδίου

Σενάριο	Μάζα Parcel ( $\times 10^{-4}$ kg)	Πλήθος Parcel	Συνολική Μάζα (kg)	Συντομογραφία
1	14,10	200000	282	200p
2	7,05	400000	282	400p
3	3,525	800000	282	800p

Πριν την παρουσίαση, σύγκριση και αξιολόγηση των αποτελεσμάτων είναι σκόπιμο να γίνει αναφορά στο υπολογιστικό κόστος της κάθε προσομοίωσης. Το υπολογιστικό κόστος (computational cost) αποτελεί το πιο κρίσιμο κριτήριο, μετά την ακρίβεια, για την αξιολόγηση μίας μεθόδου. Ειδικά για την μέθοδο MP-PIC, η παράμετρος αυτή λαμβάνει επιπρόσθετη αξία, καθότι το χαμηλό υπολογιστικό κόστος αποτελεί ένα από τα βασικά πλεονεκτήματα αυτής της μεθόδου έναντι των υπολοίπων. Παράλληλα, αυτό ακριβώς το πλεονέκτημα αποτέλεσε έναν από τους βασικούς λόγους για την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Το υπολογιστικό κόστος καθενός εκ των τριών προαναφερθέντων παρατίθεται στον επόμενο πίνακα και αφορά την επεξεργασία σε τέσσερις κεντρικές μονάδες επεξεργασίας (4 CPUs) για την προσομοίωση 10000 χρονικών βημάτων, δηλαδή 5 δευτερολέπτων ροής.

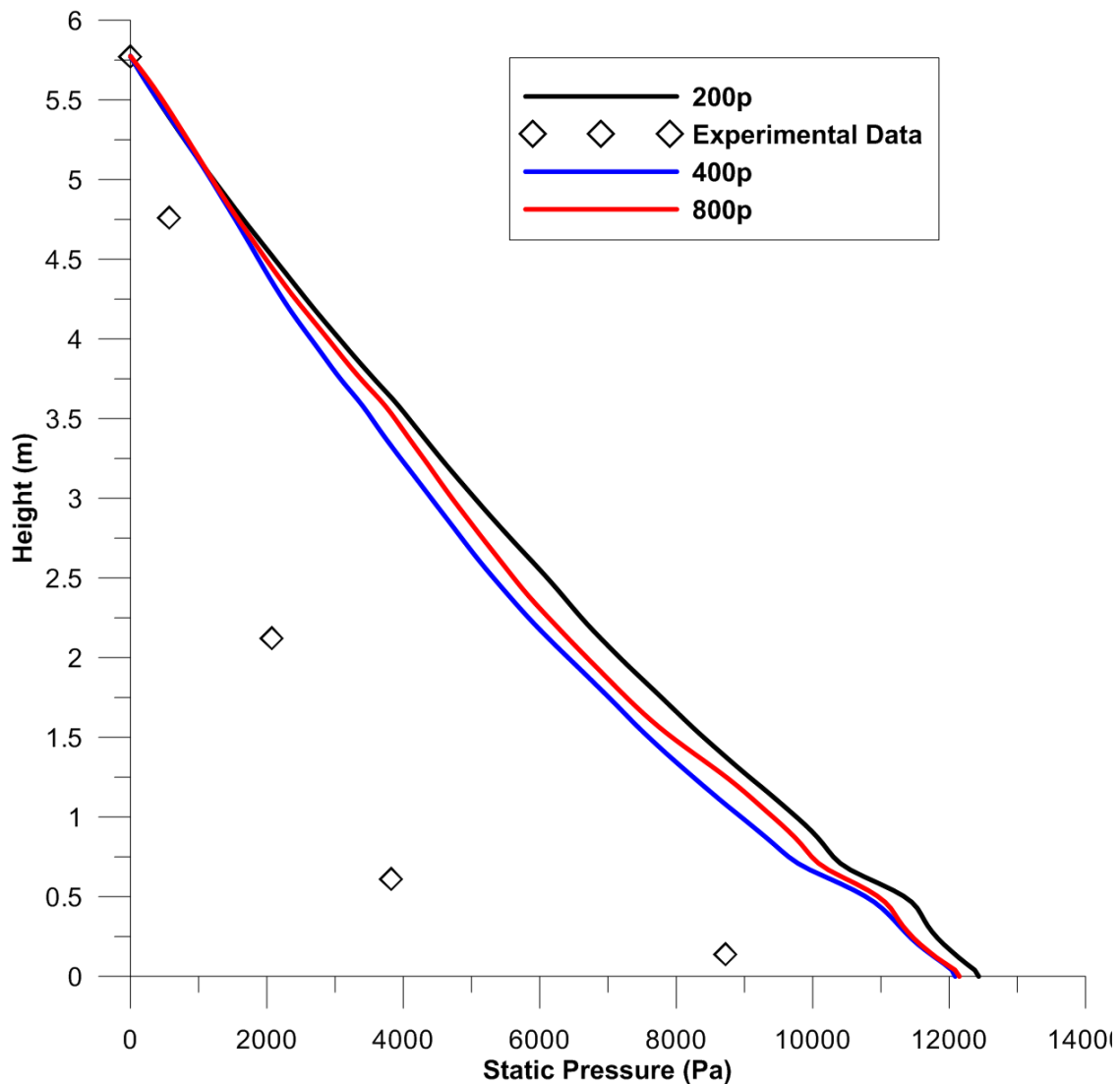
Πίνακας 5-4 Υπολογιστικό Κόστος

Σενάριο	Υπολογιστικό Κόστος (4 CPUs)
1	22,300 Ωρες
2	22,217 Ωρες
3	27,817 Ωρες

Με βάση τον προηγούμενο πίνακα, το χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος προκύπτει για το σενάριο 2 που όπως έχει ήδη αναφερθεί αποτελεί το βασικό σενάριο αυτής της διπλωματικής και όλα τα υπόλοιπα αποτελούν παραλλαγές αυτού.

Όπως ακριβώς έγινε και στην προηγούμενη ενότητα, ομοίως και σ' αυτή την περίπτωση, η διερεύνηση των τριών σεναρίων οφείλει να αρχίσει με το διάγραμμα της χρονικά μέσης στατικής πίεσης κατά τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας της

κλίνης. Για το διάγραμμα αυτό διατίθενται πειραματικές μετρήσεις, οι οποίες είναι πάντοτε η αυστηρότερη και καλύτερη απόδειξη για την ακρίβεια των αποτελεσμάτων μιας προσομοίωσης υπολογιστικής ρευστοδυναμικής.



Σχήμα 5.8 Χρονικά Μέση Στατική Πίεση κατά Μήκος του Άξονα Συμμετρίας της Κλίνης

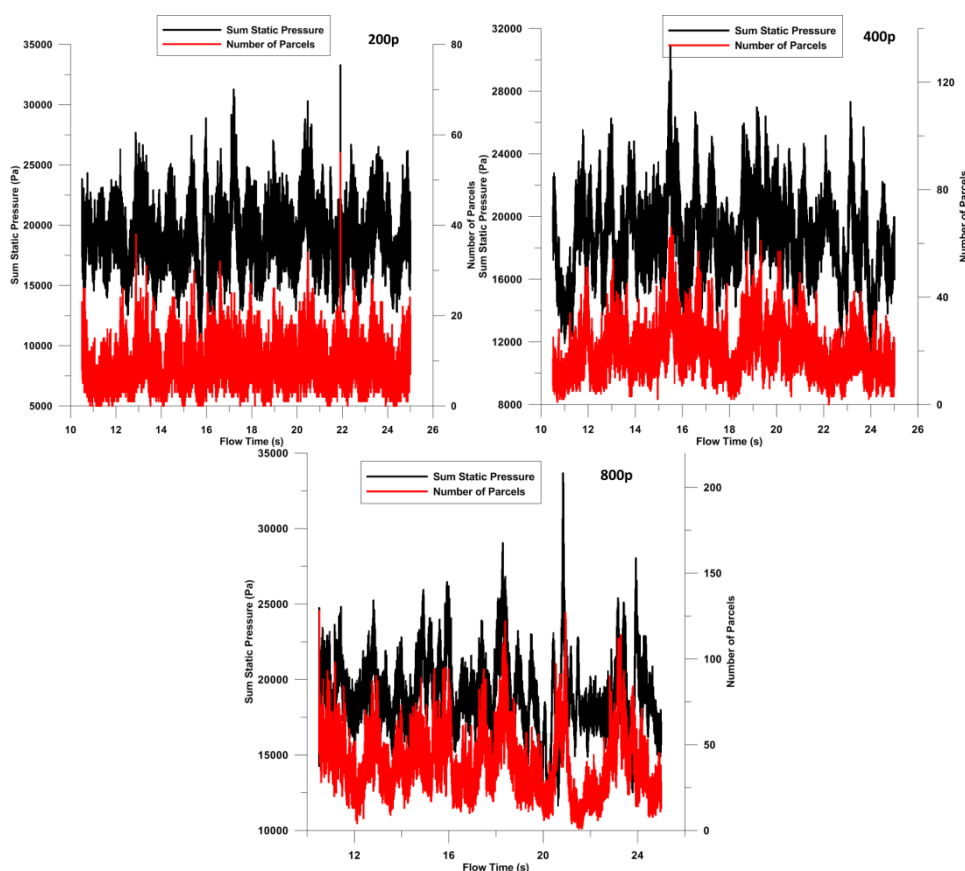
Από το Σχήμα 5.8 είναι εμφανές ότι πλησιέστερα, στα πειραματικά δεδομένα, αποτελέσματα δίνει το σενάριο 2. Δηλαδή με άλλα λόγια η αντιπροσώπευση των σωματιδίων με 400000 υπολογιστικά σωματίδια, αναπαριστά καλύτερα τη στατική πίεση στη κλίνη, από ότι η μοντελοποίηση με 800000 parcel. Η μοντελοποίηση με περισσότερα parcels είναι de facto μεγαλύτερης ακρίβειας και τα αποτελέσματα υποδεικνύουν ότι ίσως χρειάζονται περισσότερα parcels για να μην εξαρτάται καθόλου το αποτέλεσμα από την διακριτοποίησή τους. Μια τέτοια διερεύνηση δεν έλαβε χώρα λόγω του αυξανόμενου υπολογιστικού κόστους που επιφέρει η αύξηση του πλήθους των υπολογιστικών σωματιδίων.

Επίσης, παρατηρούμε εύκολα από το διάγραμμα της πίεσης, ότι ανεξάρτητα από το πλήθος των parcel, το μοντέλο του Gidasrow προλέγει σε κάθε περίπτωση σχεδόν γραμμική συμπεριφορά για την πτώση πίεσης και συνεπώς ομοιόμορφη κατανομή

των σωματιδίων στην κλίση. Παράλληλα, και τα τρία σενάρια ανεξαιρέτως, υπερεκτιμούν τη στατική πίεση σε ολόκληρο το εύρος τιμών. Αυτό μπορεί να οδηγήσει, με μία σχετική βεβαιότητα, ότι περαιτέρω αύξηση του πλήθους των σωματιδίων, δεν θα οδηγήσει σε δραματική αύξηση της ακρίβειας και ότι το μοντέλο θα εξακολουθήσει να προλέγει ομοιόμορφες κατανομές σε ολόκληρη την έκταση της κλίσης. Ένα, επιπλέον, στοιχείο που παρατηρείται και στα τρία σενάρια είναι η επίδραση της ανακυκλοφορίας των σωματιδίων, όπως αυτή αποτυπώνεται στις καμπύλες της πίεσης στην περιοχή γύρω από ύψος 0,5 m.

Είναι καίριας σημασίας, να σημειωθεί εδώ, ότι το προηγούμενο διάγραμμα είχε ουσιαστικό ρόλο στην επιλογή της εκτέλεσης όλων των υπόλοιπων προσομοιώσεων με πλήθος σωματιδίων ίσο με 400000. Το διάγραμμα αυτό σε συνδυασμό με τον Πίνακα 5-4 καταδεικνύουν εύκολα ότι το σενάριο 2 δίνει τα βέλτιστα αποτελέσματα με εφαρμογή του συμβατικού μοντέλου του Gidasrow και με το χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος παράλληλα.

Εξαιτίας, της διακύμανσης στην πίεση λόγω της ανακυκλοφορίας των σωματιδίων, κρίνεται απαραίτητο να μελετηθούν οι χρονοσειρές της στιγμιαίας στατικής πίεσης σ' ένα σημείο στον πυθμένα της κλίσης μαζί με την ανακυκλοφορία των σωματιδίων. Οι αντίστοιχες καμπύλες, για τα τρία υπό διερεύνηση σενάρια, παρατίθενται στα επόμενα σχήματα:



Σχήμα 5.9 Χρονοσειρές Πίεσης και Ανακυκλοφορίας Σωματιδίων στα Σενάρια 1, 2 και 3

Με βάση τα διαγράμματα των χρονοσειρών προκύπτει ότι οι στιγμιαίες αυξήσεις στην πίεση, λαμβάνουν χώρο ταυτόχρονα με την εισαγωγή σωματιδίων στην κλίνη. Η παρατήρηση αυτή υποδηλώνει μια εξάρτηση της στατικής πίεσης στον πυθμένα της κλίνης από την ανακυκλοφορία των σωματιδίων που δεν έχει παρατηρηθεί πειραματικά, τουλάχιστον σε τέτοιο βαθμό. Υπάρχει η πιθανότητα η συμπεριφορά αυτή του μοντέλου να είναι ένα «numerical artifact». Με τον τελευταίο όρο λογίζονται τα αριθμητικά αποτελέσματα, των οποίων οι τιμές δεν οφείλονται στη φυσική του προβλήματος, αλλά στα αριθμητικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται για την αριθμητική προσομοίωση.

Στα πλαίσια της περαιτέρω διερεύνησης για πιθανή εξάρτηση της πίεσης από το πλήθος των σωματιδίων, διεκπεραιώθηκε μία στοιχειώδης στατιστική επεξεργασία των δεδομένων των διαγραμμάτων και υπολογίστηκαν για κάθε σενάριο η μέση τιμή και η τυπική απόκλιση της στατικής πίεσης. Τα αποτελέσματα αυτής της επεξεργασίας παρατίθενται στον ακόλουθο πίνακα:

Μέγεθος	Σενάριο 1 (200p)	Σενάριο 2 (400p)	Σενάριο 3 (800p)
Μέση Τιμή (Pa)	18934	18628	18962
Τυπική Απόκλιση (Pa)	2437	2512	2400

Πίνακας 5-5 Στοιχειώδης Στατιστική Επεξεργασία της Στιγμιαίας Στατικής Πίεσης

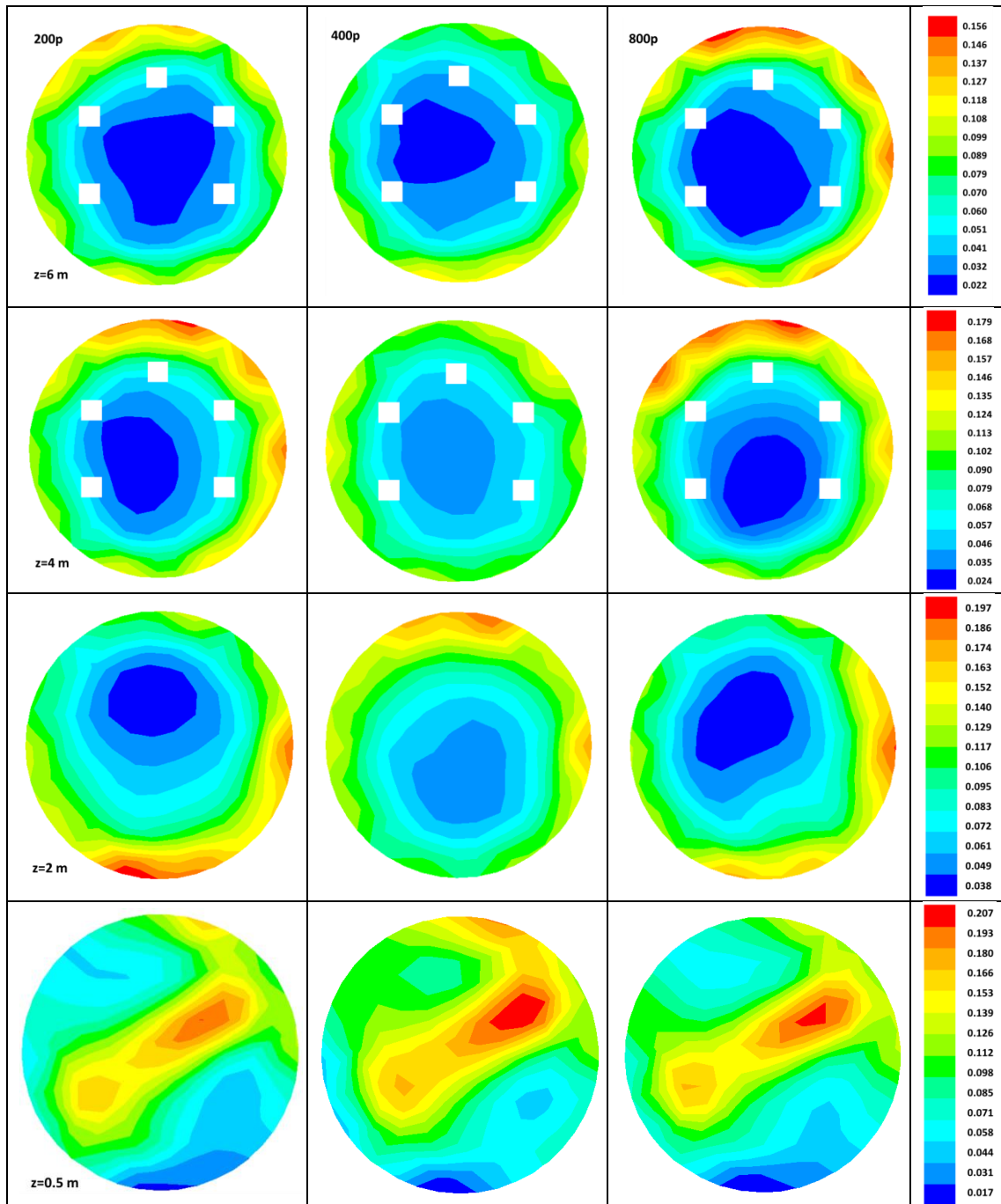
Σύμφωνα με τα δεδομένα του πίνακα Πίνακας 5-5 δεν προκύπτει κάποια εξάρτηση των διακυμάνσεων της πίεσης από το πλήθος των υπολογιστικών σωματιδίων που αντιπροσωπεύει τη στερεά φάση.

Στα πλαίσια της περαιτέρω μελέτης και εξέτασης της επίδρασης του πλήθους των υπολογιστικών σωματιδίων στην προσομοίωση της ροής, παρατίθεται το χρονικά μέσο κλάσμα όγκου της στερεάς φάσης, για κάθε σενάριο, στις διατομές της κλίνης για τα ύψη  $z=0.5, 2, 4$  και  $6$  m.

Με βάση τα χρονικά μέσα κλάσματα όγκου της στερεάς φάσης προκύπτει ότι στον πυθμένα ( $z=0.5$  m) της κλίνης και τα τρία σενάρια ακολουθούν το ίδιο μοτίβο, το οποίο είναι διαφορετικό από το πρότυπο ροής core-annulus. Στο ύψος αυτό γίνεται η είσοδος των δευτερευόντων ρευμάτων του αερίου, με συνέπεια την παρουσία χαμηλών  $\varepsilon_s$  γύρω από τα τοιχώματα και τη συγκέντρωση της στερεάς μάζας στο κέντρο της κλίνης.

Για μεγαλύτερα ύψη ( $z>2$  m) παρατηρείται ότι έχει σχηματιστεί πλέον το core-annulus, το οποίο δεν φαίνεται να επηρεάζεται από την παρουσία των αγωγών ψύξης. Παρότι οι αγωγοί μοντελοποιούνται ως συνθήκες μη ολίσθησης για την αέρια φάση, δεν παρατηρούνται αυξημένες τιμές του  $\varepsilon_s$ , όπως θα ήταν αναμενόμενο λόγω της πτώσης της ταχύτητας του αερίου. Σχετικά αυξημένες τιμές για το κλάσμα όγκου στον πυρήνα εμφανίζει μόνο το σενάριο 2 (400p) για ύψη 2 και 4 μέτρα, οδηγώντας σε μικρότερη απόκλιση τιμών μεταξύ πυρήνα και δακτυλίου. Αντίθετα, τα σενάρια για 200 και 800 χιλιάδες υπολογιστικά σωματίδια, προβλέπουν παρόμοιες τιμές και φαίνεται να αναπαριστούν καλύτερα το πρότυπο ροής.

Μια επιπλέον τάση που είναι περισσότερο εμφανής στα σενάρια 200p και 800p, είναι η σχετική αύξηση της τιμής του κλάσματος όγκου γύρω από τα τοιχώματα, σε σχέση με τις τιμές του στον πυρήνα της κλίνης. Το φαινόμενο αυτό παρατηρείται εντονότερα στο σενάριο 3 και συνεπώς μπορεί να ειπωθεί, ότι είναι σε θέση να περιγράψει καλύτερα, πάντα ποιοτικά, το core-annulus.



Σχήμα 5.10 Χρονικά Μέσα Κλάσματα Όγκου της Στερεάς Φάσης σε Διαφορετικά Ύψη για τα Σενάρια 1, 2 και 3

Ένα μοτίβο που επίσης συναντάται και στις τρεις περιπτώσεις, είναι η παρουσία γενικά μεγαλύτερων κλασμάτων όγκου στα δεξιά τοιχώματα της κλίνης, σε σχέση με τα αντίστοιχα στα αριστερά. Η ασυμμετρία αυτή στο πεδίο, οφείλεται κατά κύριο



λόγο στην έξοδο της κλίνης, η οποία είναι τοποθετημένη στην πλευρά των παρατηρούμενων μεγαλύτερων κλασμάτων όγκων. Η τοποθέτηση της σε μη συμμετρική θέση έχει ως συνέπεια, να «οδηγεί» τη ροή του αερίου και των σωματιδίων προς τη μία πλευρά της κλίνης και κατ' αυτό τον τρόπο να προκαλεί την ανισοκατανομή της στερεάς φάσης στα τοιχώματα.

Το διάγραμμα της χρονικά μέσης ταχύτητας ολίσθησης καθ' ύψος της κλίνης επιλέχθηκε να παραλειφθεί και να μην παρατεθεί, καθότι τα τρία σενάρια δεν προέλεξαν σημαντικές διαφορές στις τιμές αυτής της ταχύτητας, με τις καμπύλες να παρουσιάζουν πολύ μικρές αποκλίσεις. Οι σχετικά καλύτερα αποτελέσματα προήλθαν από το βασικό σενάριο 400p.

### 5.2.2. Συντελεστής Βαρύτητας (Kernel)

Στην υποενοότητα αυτή διερευνάται η επίδραση στην αέρια φάση, της κατανομής των μεγεθών ενός υπολογιστικού σωματιδίου πέραν του κελιού, στο οποίο εντοπίζεται και στα γειτονικά του. Η κατανομή αυτή επιτυγχάνεται μέσω των κοινών κόμβων των γειτονικών κελιών και εκφράζεται μέσω της εξίσωσης (4.30). Στη σχέση αυτή έχει καθοριστική σημασία ο εφαρμοζόμενος συντελεστής βαρύτητας (kernel).

Τα σενάρια, στα οποία εξετάζεται η επίδραση των διαφορετικών συντελεστών βαρύτητας στην υδροδυναμική συμπεριφορά του ενανθρακωτή, είναι το 2 και τα 4 έως 8 του Πίνακα 5-1. Στα περισσότερα από αυτά γίνεται εφαρμογή του συντελεστή που περιγράφεται από μια κατανομή Gauss και ο οποίος περιλαμβάνει μία παράμετρο  $\alpha$ , που καθορίζεται από τον χρήστη. Η παράμετρος αυτή χρησιμοποιείται για να ελέγχει την τυπική απόκλιση της κανονικής κατανομής. Ο συντελεστής αυτός περιγράφεται από τη σχέση (4.34), η οποία για λόγους πληρότητας επαναλαμβάνεται ακολούθως:

$$w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}) = \frac{\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-\alpha \frac{|\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}|^2}{\Delta x^2}\right)}{\sum_i [w(\vec{x}_p^k - \vec{x}_{node}^i)]} \quad (5.1)$$

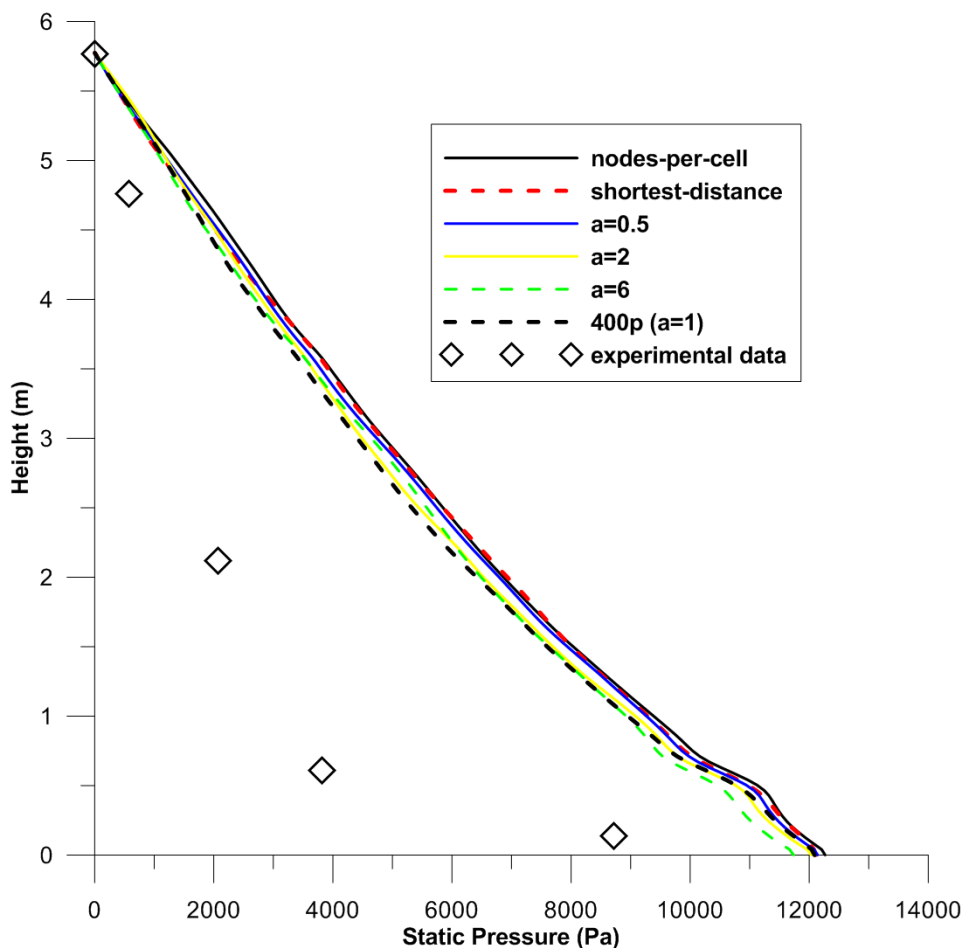
Από τη προηγούμενη σχέση είναι εμφανές ότι με αύξηση της τιμής της παραμέτρου  $\alpha$ , αυξάνεται η απόλυτη τιμή του εκθέτη του νεπέριου και κατ' επέκταση μειώνεται η τιμή του συντελεστή βαρύτητας. Για την παράμετρο  $\alpha$  επιλέχθηκαν να εξεταστούν οι τιμές 0,5, 1, 2 και 6. Ο συντελεστής αυτός με παράμετρο  $\alpha=1$  αποτελεί την προεπιλεγμένη επιλογή του ANSYS FLUENT, ενώ οι τιμές 0,5 και 6 επιλέχθηκαν με βάση την διεθνή βιβλιογραφία. Συγκεκριμένα, οι (Apte et al., 2008) χρησιμοποίησαν μια «πλατιά» κατανομή με  $\alpha=0,5$ , ενώ οι (Kaufmann et al., 2008) μια «στενή» κατανομή με παράμετρο  $\alpha=6$ . Η τιμή  $\alpha=2$  επιλέχθηκε ως ενδιάμεση τιμή μεταξύ των τιμών ένα και έξι.

Η μελέτη των σχετικών σεναρίων ακολουθεί παρόμοιο τρόπο παρουσίασης μ' αυτούς που χρησιμοποιήθηκαν στις προηγούμενες ενότητες. Ειδικότερα, πρώτα παρατίθεται το διάγραμμα της χρονικά μέσης στατικής πίεσης καθ' ύψος της κλίνης, στη συνέχεια

το διάγραμμα του λόγου της χρονικά μέσης ταχύτητας ολίσθησης προς την τερματική ταχύτητα των σωματιδίων και τέλος τα χρονικά μέσα κλάσματα όγκου της στερεάς φάσης σε τέσσερα χαρακτηριστικά ύψη της κλίνης.

Στην επόμενη σελίδα, στο Σχήμα 5.11 παρουσιάζεται η χρονικά μέση στατική πίεση για τα 6 υπό μελέτη σενάρια. Είναι χαρακτηριστικό, ότι η γραμμική εξάρτηση του μοντέλου του Gidasrow, μεταξύ πτώσης πίεσης και ύψους της κλίνης διατηρείται για όλους τους συντελεστές ανεξάρτητα. Σε συμφωνία, με τις διαπιστώσεις των προηγούμενων ενοτήτων, όλες οι προσομοιώσεις υπερεκτιμούν τη στατική πίεση και προλέγουν σημαντικές αποκλίσεις από τις πειραματικές μετρήσεις. Ωστόσο, οι μεταξύ τους αποκλίσεις είναι σχετικά ασήμαντες στο μεγαλύτερο μέρος τους.

Σχετικά με τις, μεταξύ των καμπυλών, διαφορές οι χειρότερες προβλέψεις προκύπτουν για τους συντελεστές της ισοκατανομής στους κόμβους (nodes-per-cell) και της ελάχιστης απόστασης (shortest-distance) αντίστοιχα. Συγκριτικά με τους προηγούμενους, ο συντελεστής κανονικής κατανομής προσφέρει καλύτερα αποτελέσματα ανεξάρτητα της τιμής της παραμέτρου  $a$ .

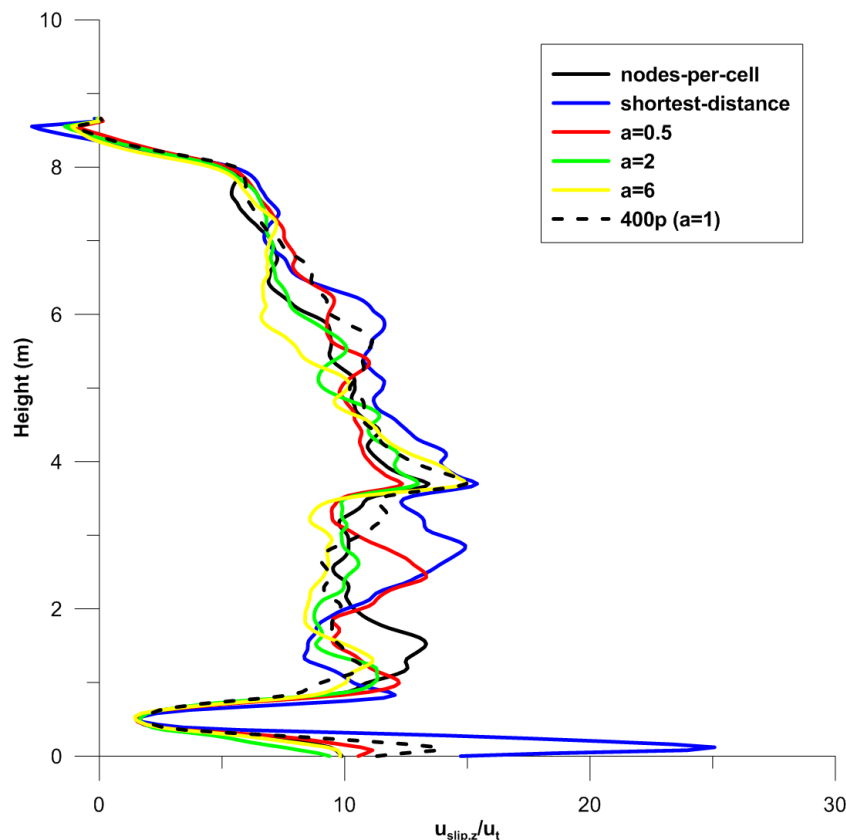


Σχήμα 5.11 Χρονικά Μέση Στατική Πίεση κατά Μήκος του Άξονα Συμμετρίας της Κλίνης

Στη περίπτωση της κατανομής Gauss, τα λιγότερο ακριβή αποτελέσματα προκύπτουν στην εφαρμογή της  $a=0,5$ , ενώ τα καλύτερα για τις τιμές 1 και 6. Με άλλα λόγια,

δηλαδή, αύξηση της τιμής της παραμέτρου δεν συνεπάγεται και αναγκαστικά ακριβέστερα αποτελέσματα. Για την περίπτωση της παραμέτρου με τιμή ίση με τη μονάδα, στην αρχή του freeboard προκύπτουν τα καλύτερα αποτελέσματα, ενώ η τιμή  $a=6$  προβλέπει καλύτερα την πίεση στον πυθμένα. Συμπερασματικά, η επιλογή του συντελεστή βαρύτητας δεν επιδρά σημαντικά στη πρόβλεψη της πίεσης.

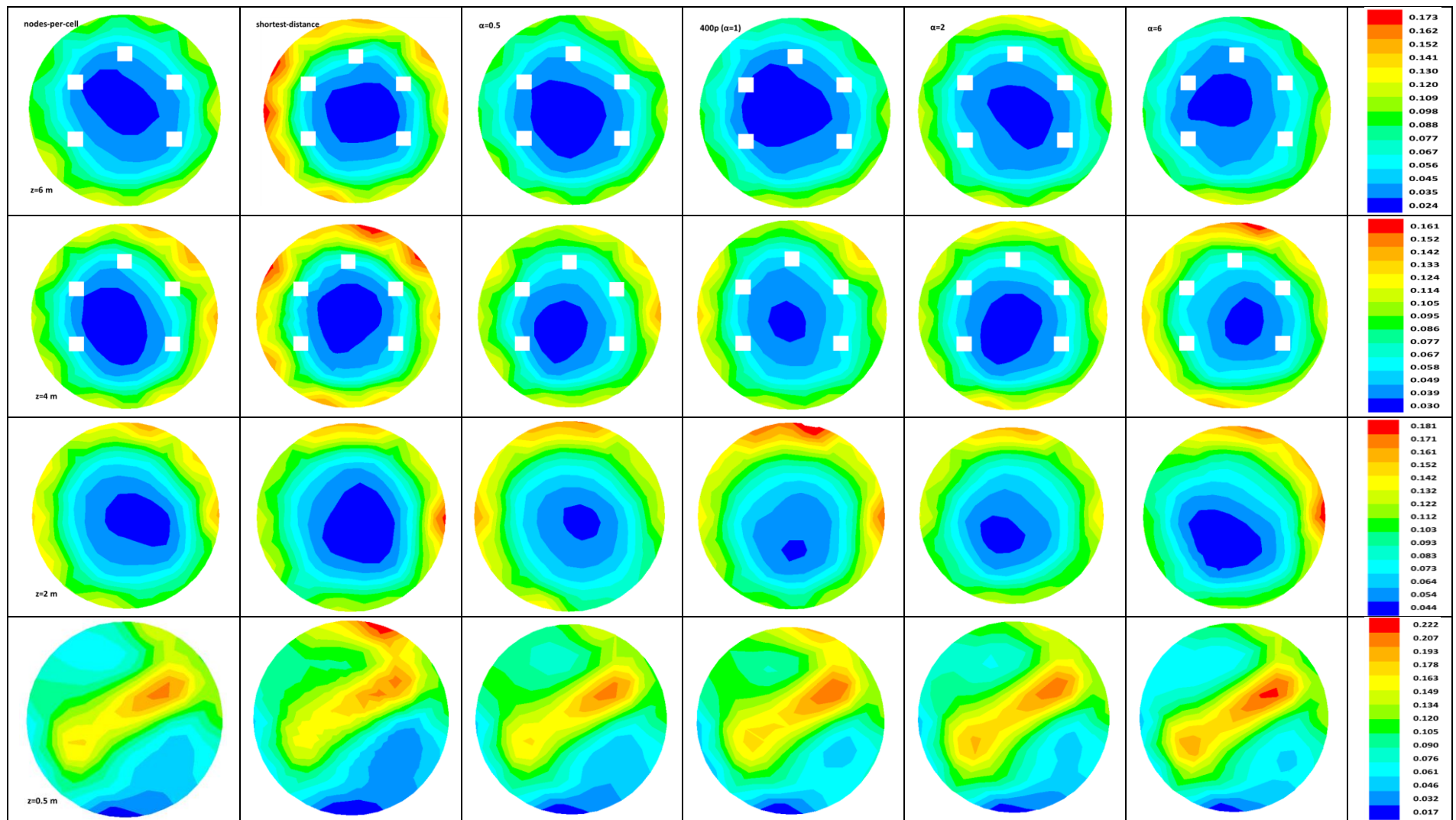
Αναφορικά με τη χρονικά μέση ταχύτητα ολίσθησης, το μοτίβο των υψηλών τιμών του λόγου των ταχυτήτων ακολουθείται από όλα τα σενάρια, πάρα τις αποκλίσεις που εμφανίζουν στις τιμές τους. Στο μεγαλύτερο μέρος της κλίνης οι τιμές του λόγου που παρατηρούνται είναι της τάξης του 10. Σχετικά με τις επιμέρους καμπύλες, οι κανονικές κατανομές δίνουν ακριβέστερα αποτελέσματα από τους άλλους δύο συντελεστές, ενώ αύξηση της τιμής της παραμέτρου  $a$  οδηγεί σε σχετικά χαμηλότερες τιμές.



Σχήμα 5.12 Χρονικά Μέση Ταχύτητα Ολίσθησης κατά τη Διεύθυνση  $z$

Στην επόμενη σελίδα παρατίθενται τα χρονικά μέσα κλάσματα όγκου στα ύψη 0,5, 2, 4 και 6 μέτρα για όλα τα σχετικά σενάρια.

Στο Σχήμα 5.13 είναι αμέσως εμφανές ότι στο πυθμένα ( $z=0,5$  m) όλοι οι συντελεστές βαρύτητας προβλέπουν σχεδόν το ίδιο μοτίβο, ενώ στα κλάσματα όγκου παρατηρούνται ελάχιστες διαφορές. Στα μεγαλύτερα ύψη, το πρότυπο ροής core-annulus φαίνεται να περιγράφεται καλύτερα από το συντελεστή nodes-per-cell, ο οποίος προβλέπει σχεδόν συμμετρικά προφίλ παρά την επίδραση της εξόδου και τις ασυμμετρίες που αυτή προκαλεί.



Σχήμα 5.13 Χρονικά Μέσα Κλάσματα Όγκου της Στερεάς Φάσης σε Διαφορετικά Ύψη για τα Σενάρια 2 και 4 έως 8

Αντιθέτως, στις κατανομές Gauss παρατηρούνται αρκετές διαφορές, όσον αφορά τον πυρήνα (core) στα ενδιάμεσα ύψη ( $z=2, 4$  m). Η περιοχή του πυρήνα με το χαμηλότερο κλάσμα όγκου διαφέρει σημαντικά τόσο προς το μέγεθος, όσο και προς τη θέση του στη διατομή. Παράλληλα προλέγονται ασύμμετρες κατανομές του κλάσματος όγκου στη διατομή. Στο μεγαλύτερο ύψος ( $z=6$  m) παρατηρείται αύξηση της επιφάνειας του πυρήνα όσο μειώνεται η τιμή της παραμέτρου  $\alpha$ .

Ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον στοιχείο είναι ότι το σενάριο 5 (shortest-distance) προβλέπει μεγαλύτερα κλάσματα όγκου στα αριστερά τοιχώματα, δηλαδή απέναντι από την έξοδο της κλίνης, σε αντίθεση με τα υπόλοιπα σενάρια. Αυτό σε συνδυασμό με το γεγονός ότι θεωρητικώς το μοντέλο αυτό είναι το ποίο αδύναμο από αυτά που εξετάστηκαν, υποδηκνύει πως τα αποτελέσματα αυτού του μοντέλου είναι αυτά με τη λιγότερη ισχύ.

### 5.2.3. Συντελεστής Αποκατάστασης Σωματιδίου-Τοιχώματος $e_{sw}$

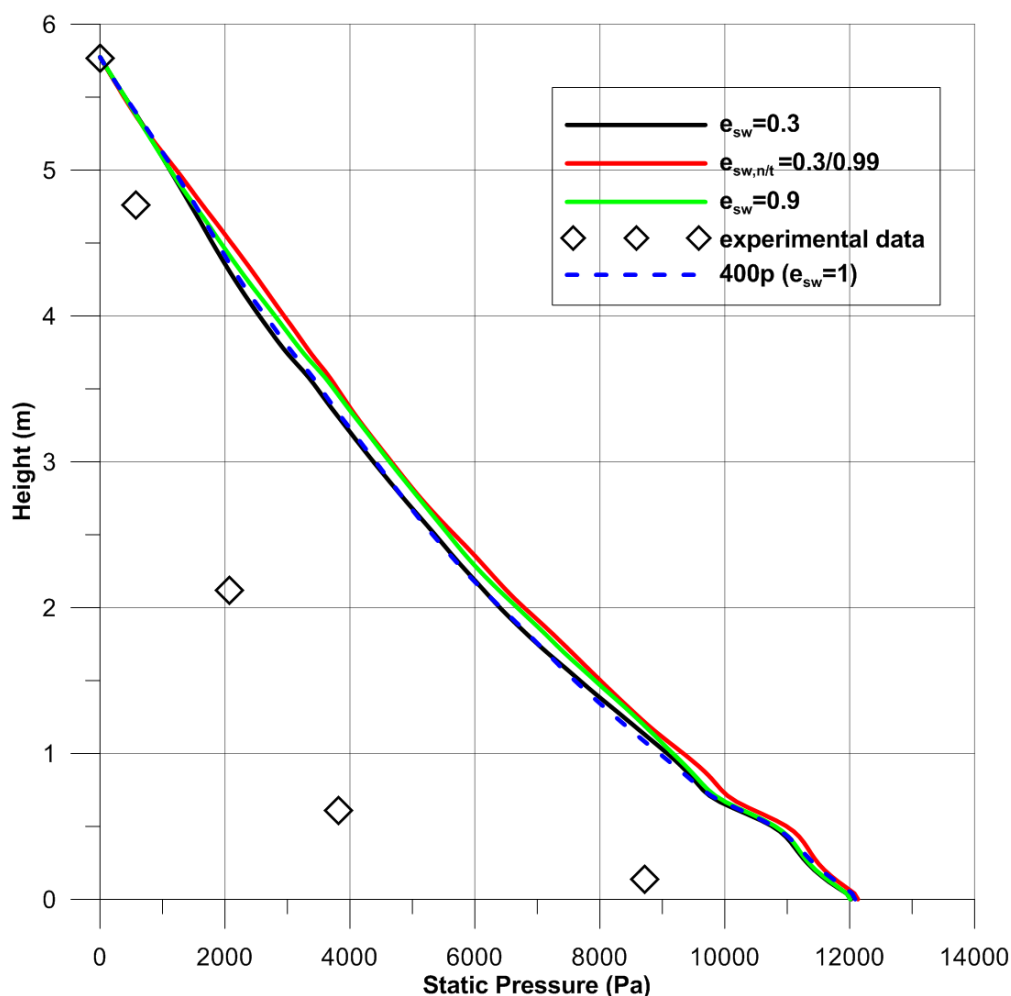
Σκοπός της παρούσας υποενότητας είναι η ανάλυση και μελέτη της επίδρασης του συντελεστή αποκατάστασης σωματιδίου-τοιχώματος στην υδροδυναμική συμπεριφορά της κλίνης.

Η διερεύνηση του συντελεστή αποκατάστασης έχει ιδιαίτερη σημασία, διότι σύμφωνα με την προηγούμενη σχέση λειτουργεί ουσιαστικά ως ένας περιορισμός στην ταχύτητα του σωματιδίου. Ο περιορισμός αυτός της ταχύτητας μπορεί να οδηγήσει σε αυξημένα κλάσματα όγκου στα τοιχώματα της κλίνης και να επηρεάσει την υδροδυναμική συμπεριφορά της. Ο συντελεστής αυτός διακρίνεται στον κάθετο στο τοίχωμα και στον εφαπτομενικό, ανάλογα με τη διεύθυνση της ταχύτητας του σωματιδίου.

Το κύριο χαρακτηριστικό των τιμών των συντελεστών αποκατάστασης σωματιδίου-τοιχώματος είναι ότι δεν υπάρχουν πειραματικές μετρήσεις γι' αυτές και η επιλογή τους γίνεται κατά βάση εμπειρικά. Οι προεπιλεγμένες τιμές του ANSYS FLUENT είναι ίσες με τη μονάδα και για τις δύο διευθύνσεις. Στο σενάριο 10 οι τιμές 0,3 και 0,99 για τον κάθετο και τον εφαπτομενικό συντελεστή αντίστοιχα, έχουν χρησιμοποιηθεί στη διεθνή βιβλιογραφία από τον (Albaid, 2015), με εφαρμογή σε γυάλινα σφαιρίδια. Στα σενάρια 9 και 11 χρησιμοποιούνται οι τιμές 0,3 και 0,9 αντίστοιχα και για τους δύο συντελεστές. Η πρώτη περίπτωση είναι μια ακραία τιμή, η οποία δε συναντάται στην πραγματικότητα και χρησιμοποιήθηκε καθαρά για λόγους εξέτασης της επίδρασης. Αντιθέτως, η τιμή 0,9 κυμαίνεται στις συνήθεις τιμές που απαντώνται στη διεθνή βιβλιογραφία.

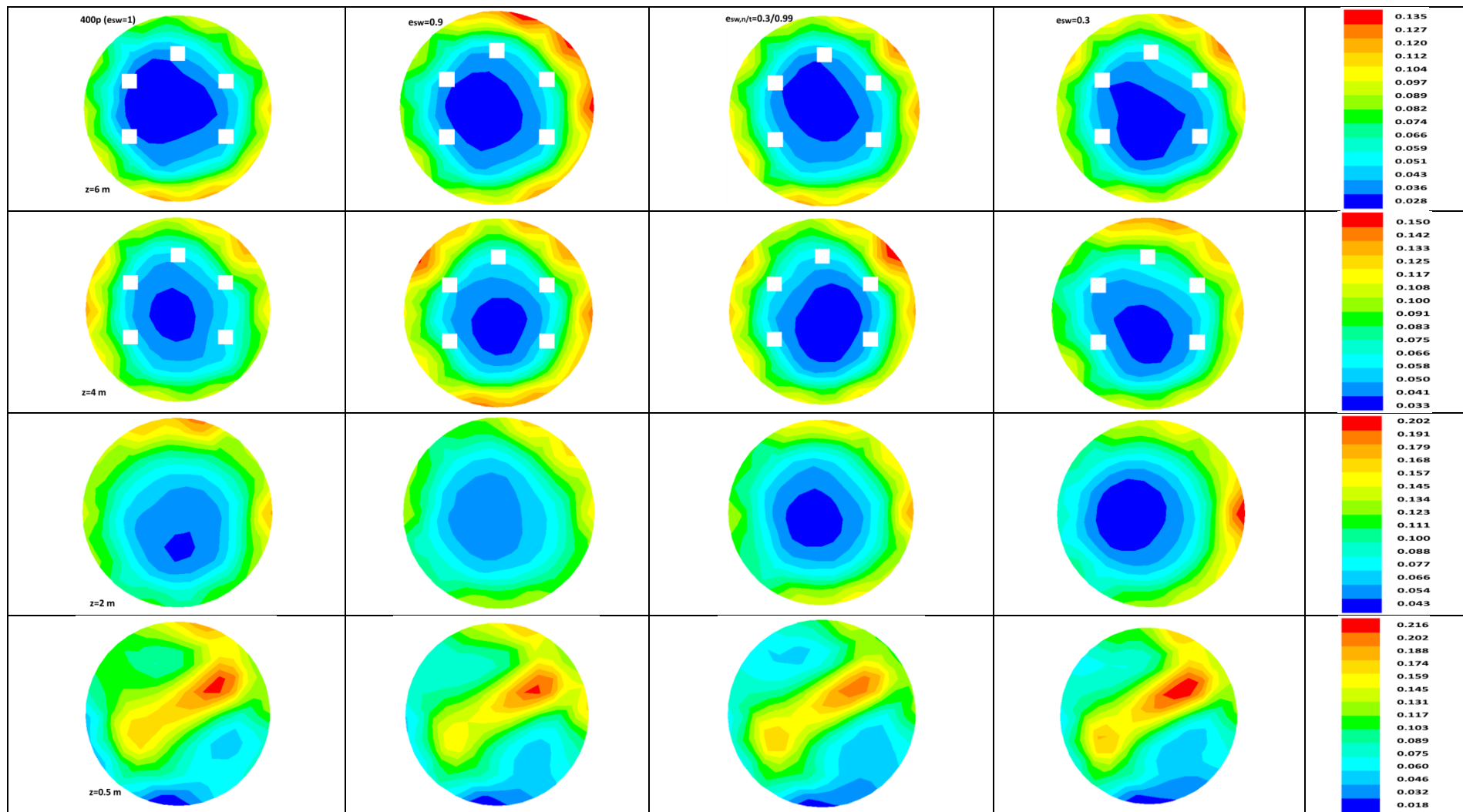
Στο Σχήμα 5.14 παρουσιάζεται η χρονικά μέση στατική πίεση κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα συμμετρίας του ενανθρακωτή. Εύκολα προκύπτει ότι οι παρατηρήσεις των προηγούμενων παραμετρικών αναλύσεων ισχύουν και στην περίπτωση αυτή. Τόσο η ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων, του μοντέλου του Gidasporw, σ' όλη την έκταση της κλίνης, όσο και η υπερεκτίμηση της πίεσης σε ολόκληρη την κλίνη διαπιστώνονται για όλα τα σενάρια.

Όσον αφορά τις τέσσερις καμπύλες, οι αποκλίσεις μεταξύ τους είναι σχεδόν αμελητέες και οι καμπύλες πρακτικά ταυτίζονται μεταξύ τους. Τα σχετικά καλύτερα αποτελέσματα προκύπτουν για την εφαρμογή της τιμής 0,3 και για τους δύο συντελεστές αποκατάστασης. Ωστόσο, η τιμή αυτή, όπως έχει ήδη αναφερθεί, δεν ανταποκρίνεται στις φυσικές τιμές του συντελεστή και έχει μόνο θεωρητικό ενδιαφέρον για τη μελέτη της γενικότερης επίδρασής της στην υδροδυναμική. Επομένως, η τιμή του  $e_{sw}$  δεν έχει ουσιαστική επίδραση στην στατική πίεση της κλίνης.



Σχήμα 5.14 Χρονικά Μέση Στατική Πίεση κατά Μήκος του Άξονα Συμμετρίας του Ενανθρακωτή

Τα χρονικά μέσα κλάσματα όγκου της στερεάς φάσης παρουσιάζονται στην ακόλουθη σελίδα. Οι παρατηρήσεις των προηγούμενων ενοτήτων για το πρότυπο ροής core-annulus ισχύουν και σ' αυτή τη περίπτωση, ενώ φαίνεται ο  $e_{sw,i}$  (ανεξαρτήτως διεύθυνσης) να έχει πολύ περιορισμένη επίδραση στα κλάσματα όγκου της στερεάς φάσης. Το core-annulus δε σχηματίζεται στον πυθμένα της κλίνης εξαιτίας των δευτερευόντων ρευμάτων, σε αντίθεση με την ενδιάμεση ζώνη και το freeboard.

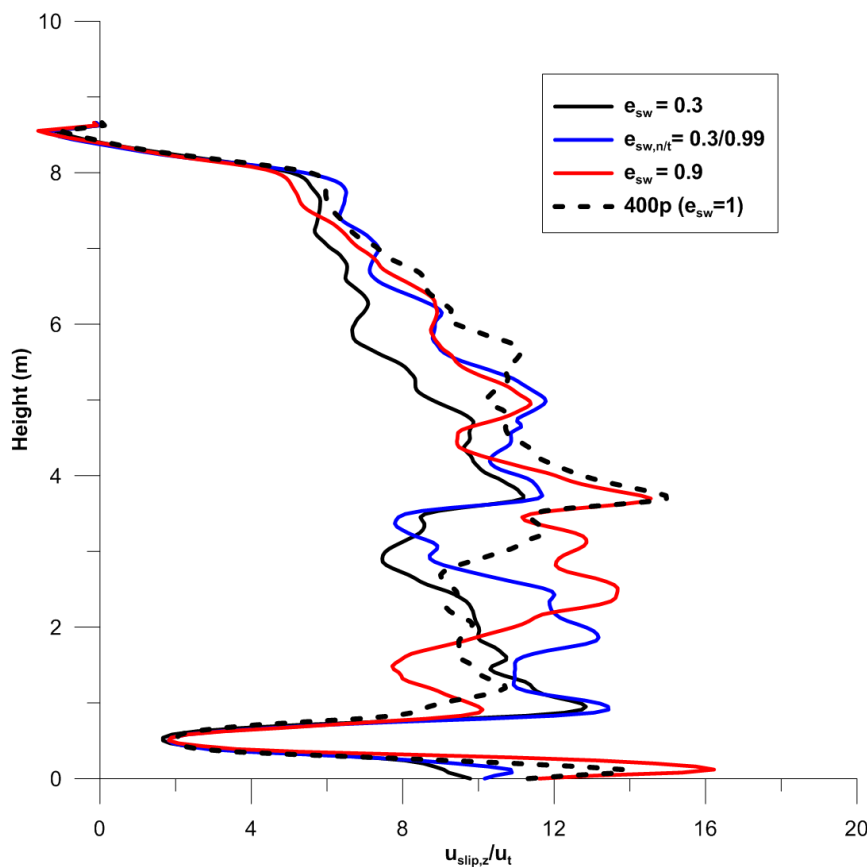


Σχήμα 5.15 Χρονικά Μέσα Κλάσματα Όγκου της Στερεάς Φάσης σε Διαφορετικά Ύψη για τα Σενάρια 2, 9, 10 και 11

Τα τέσσερα σενάρια μένουν συνεπή με τις προηγούμενες παρατηρήσεις για αυξημένα κλάσματα όγκου στη πλευρά της εξόδου της κλίνης (πάνω και δεξιά). Για ύψη  $z \geq 4$  m, τα σενάρια 9 ( $e_{sw}=0.3$ ) και 10 ( $e_{sw}=0.3-0.99$ ) φαίνεται να επηρεάζονται λιγότερο από την παρουσία της εξόδου, καθώς προβλέπουν πιο ομοιογενείς κατανομές για το χρονικά μέσο κλάσμα όγκου στις διατομές.

Αντιθέτως, το σενάριο 9 δεν συμπεριφέρεται αντίστοιχα για μικρότερα ύψη και να εμφανίζει έντονα μη συμμετρικά κλάσματα όγκου. Σε ύψος δύο μέτρων η συγκέντρωση των σωματιδίων στα αριστερά τοιχώματα, είναι πολύ χαμηλή σε σχέση με την αντίστοιχη στα δεξιά και πολύ κοντά στη τιμή του κλάσματος στον πυρήνα. Αυτό έχει ως συνέπεια, με δυσκολία, να μπορεί να θεωρηθεί ότι παρουσιάζει το core-annulus.

Αναφορικά με τις υψηλότερες τιμές του  $e_s$ , το σενάριο 11 ( $e_{sw,i}=0.9$ ) προβλέπει τις μεγαλύτερες τιμές για ύψη  $z \geq 4$  m, ενώ σε μικρότερα ύψη, οι πιο ακραίες τιμές παρατηρούνται από το σενάριο 9. Η συμπεριφορά αυτή δεν μπορεί να θεωρηθεί αναμενόμενη, καθότι η εφαρμογή χαμηλών τιμών στον κάθετο συντελεστή αποκατάστασης, θα όφειλε να οδηγήσει σε αυξημένα κλάσματα κοντά στα τοιχώματα. Η μείωση της ταχύτητας εκφυγής (ανάκλασης) από τα τοιχώματα θα αναμενόταν να έχει ως συνέπεια αυξημένη συγκέντρωση της στερεάς φάσης στα τοιχώματα, λόγω των χαμηλότερων ταχυτήτων της στη περιοχή αυτή.



Σχήμα 5.16 Χρονικά Μέση Ταχύτητα Ολίσθησης κατά τη Διεύθυνση z



Στο σχήμα της προηγούμενης σελίδας παρατίθεται το διάγραμμα της χρονικά μέσης ταχύτητας ολίσθησης, αδιαστατοποιημένης με τη τερματική ταχύτητα των σωματιδίων.

Με βάση το Σχήμα 5.16 παρατηρείται η πρόβλεψη υψηλών τιμών του λόγου, σε σχεδόν όλη την έκταση της κλίνης, από όλα τα σενάρια. Επίσης είναι φανερό ότι η μείωση της τιμής του συντελεστή αποκατάστασης συνεπάγεται και μείωση της ταχύτητας ολίσθησης. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ότι για ύψη  $z \geq 4$  m η καμπύλη (μπλε γραμμή) του σεναρίου 10, έχει κοντινές τιμές με την καμπύλη του  $e_{sw}=0.9$ , ενώ αντίθετα για μικρότερα ύψη, οι δύο καμπύλες απομακρύνονται. Έτσι, φαίνεται στα χαμηλά ύψη ο κάθετος συντελεστής αποκατάστασης να έχει μεγαλύτερη επίδραση από τον εφαπτομενικό, ενώ για μεγαλύτερα ύψη η τάση αυτή να αντιστρέφεται και να αυξάνεται η επίδραση του εφαπτομενικού.

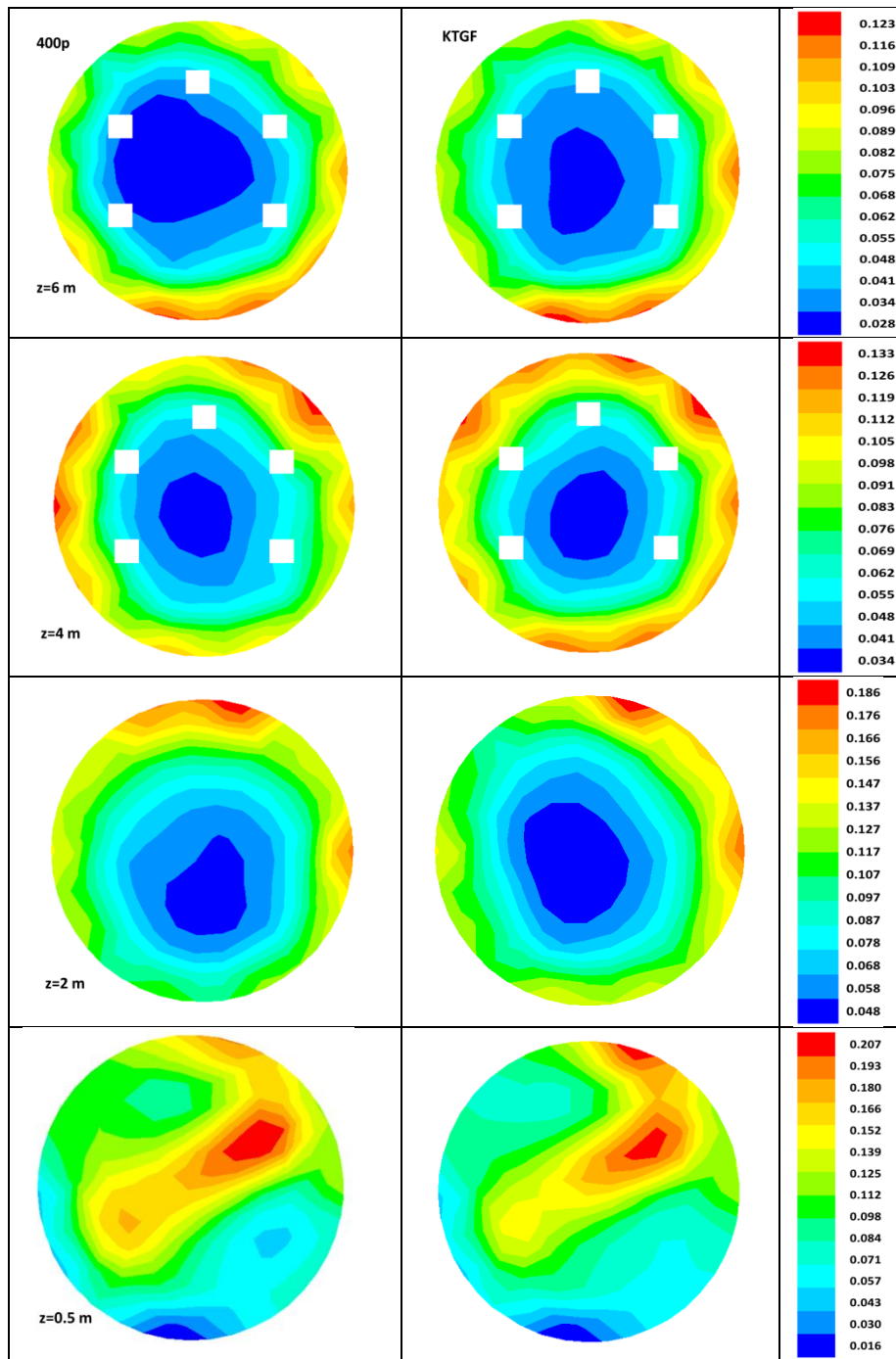
#### 5.2.4. Μοντέλα Κινητικής Θεωρίας Κοκκωδών Ροών (KTGF)

Η διερεύνηση της εφαρμογής διαφορετικών μοντέλων της κινητικής θεωρίας (σενάρια 2 και 12) αποτελεί το σκοπό της υποενότητας. Τα μοντέλα της κινητικής θεωρίας των κοκκωδών ροών που εξετάζονται στο σημείο αυτό, έχουν ήδη παρουσιαστεί στην αρχή του παρόντος κεφαλαίου, ενώ οι αντίστοιχες σχέσεις που τα περιγράφουν έχουν ήδη διατυπωθεί στο κεφάλαιο 4.

Στην υποενότητα, δεν ακολουθείται η συνήθης πορεία παρουσίασης των αποτελεσμάτων των σχετικών προσομοιώσεων. Τα διαγράμματα της χρονικά μέσης πίεσης και μέσης ταχύτητας ολίσθησης δεν έδειξαν σημαντικές διαφοροποιήσεις και για το λόγο αυτό θεωρήθηκε σκόπιμο να παραλειφθούν και να παρουσιαστούν μόνο τα χρονικά μέσα κλάσματα.

Όσον αφορά την στατική πίεση οι καμπύλες ταυτίζονταν μεταξύ τους με αμελητέες αποκλίσεις κατά διαστήματα, με το μοντέλο του Νικολόπουλου να προλέγει ελάχιστα καλύτερα αποτελέσματα. Αντίστοιχα, κινούνταν και το διάγραμμα της ταχύτητας ολίσθησης, όπου οι δύο καμπύλες των 400p και KTGF αντίστοιχα αλληλοεπικαλύπτονταν κατά το μεγαλύτερο μέρος τους, με το μοντέλο του Νικολόπουλου να προβλέπει ελάχιστα μικρότερες ταχύτητες ολίσθησης.

Στο σχήμα της επόμενης σελίδας παρατίθενται τα χρονικά μέσα κλάσματα όγκου της στερεάς φάσης στα ύψη 0,5, 2, 4 και 6 μέτρα. Το σενάριο KTGF παρουσιάζει σε όλα τα εξεταζόμενα ύψη παρόμοιες κατανομές με τη βασική προσομοίωση 400p, προβλέποντας σωστά το core-annulus στα μεγαλύτερα ύψη και το αντίστοιχο μοτίβο του πυθμένα. Η κύρια διαφοροποίηση στα δύο σενάρια οφείλεται στο ότι το KTGF προβλέπει πιο ομοιογενή κατανομή μεταξύ πυρήνα και δακτυλίου, δηλαδή μικρότερες αποκλίσεις στα κλάσματα όγκου. Συμπερασματικά, το μοντέλο του Νικολόπουλου (Νικολόπουλος, 2014) φαίνεται να προβλέπει καλύτερα αποτελέσματα, έναντι του συμβατικού.



Σχήμα 5.17 Χρονικά Μέσα Κλάσματα Όγκου της Στερεάς Φάσης σε Διαφορετικά Ύψη για τα Σενάρια 2, 12 και 13

## 6. Συμπεράσματα – Μελλοντική Εργασία

### 6.1. Συμπεράσματα

Η υπό διερεύνηση μονάδα της παρούσας διπλωματικής εργασίας αποτελείται από δύο υδροδυναμικά συζευγμένες κλίνες (DFB) και βρίσκεται στο Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο του Darmstadt (TU Darmstadt). Στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας αναπτύχθηκε η αριθμητική προσομοίωση της ροής στον ενανθρακωτή (ρευστοποιημένη κλίνη ανακυκλοφορίας) της προαναφερθείσας μονάδας.

Για τη προσομοίωση της υδροδυναμικής συμπεριφοράς της κλίνης εφαρμόστηκε το στοχαστικό μοντέλο Euler-Lagrange (MP-PIC) και η ροή μοντελοποιήθηκε ως τρισδιάστατη, ισοθερμοκρασιακή. Επιπλέον, της μοντελοποίησης της ροής πραγματοποιήθηκε σύγκριση των αποτελεσμάτων της μεθόδου MP-PIC με την ανταγωνιστική μέθοδο TFM (Zeneli et al., 2015), ενώ παράλληλη διερευνήθηκε η επίδραση σημαντικών παραμέτρων της ροής.

Αρχικά, επιβεβαιώθηκε το χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος της υπ' όψη μεθόδου, συγκρινόμενο με το αντίστοιχο της μεθόδου TFM, καθότι απαιτούνται περίπου 22 ώρες για την προσομοίωση 5 δευτερολέπτων ροής με χρήση 4 CPUs. Αυτό πρακτικά δηλώνει μια μείωση της τάξης του 20% στο χρόνο επίλυσης, σύμφωνα με τις τιμές που προέκυψαν για την μέθοδο TFM (Zeneli et al., 2015). Πρέπει να τονιστεί, αυτή η μείωση ενδέχεται να είναι μεγαλύτερη σε προσομοιώσεις κλινών βιομηχανικής κλίμακας. Αυτό οφείλεται, στο περιορισμό που τίθεται στην μέθοδο TFM, σχετικά με την πυκνότητα του πλέγματος. Συγκεκριμένα, η εφαρμογή πλέγματος αντίστοιχης πυκνότητας σε μεγαλύτερες κλίνες, μπορεί να οδηγήσει σε υπερβολικά μεγάλο πλήθος κελιών, ανάλογα με το μέγεθος της κλίνης. Ωστόσο, και η χρήση αραιότερων πλεγμάτων δεν είναι πάντα εφικτή, καθότι μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικά σφάλματα (Νικολόπουλος, 2014). Αντιθέτως, στις μεθόδους περιγραφής κατά Lagrange δεν υφίστανται τόσο στενοί περιορισμοί, καθότι η διακριτή στερεά φάση δεν εξαρτάται από την πυκνότητα του πλέγματος, όπως η αέρια, επιτρέποντας μεγαλύτερη ευελιξία στην εφαρμογή αραιότερων πλεγμάτων.

Στη συνέχεια, προσομοιώθηκε η ροή με εφαρμογή του συμβατικού μοντέλου του Gidaspow και του εξελιγμένου μοντέλου EMMS. Στα πλαίσια της διερεύνησης αυτής, εξετάστηκαν κύρια μεγέθη της ροής, όπως η χρονικά μέση στατική πίεση για την οποία υπήρχαν διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις και διαπιστώθηκε η καλύτερη σύγκλιση των αποτελεσμάτων του EMMS. Στα υπόλοιπα μεγέθη, η διερεύνηση ήταν ποιοτική λόγω έλλειψης πειραματικών δεδομένων, με ποιο ενδιαφέρουσα την εξέταση της ταχύτητας ολίσθησης, η οποία παρουσίασε ασυνήθιστα υψηλές τιμές.

Στα πλαίσια της παραμετρικής ανάλυσης, μελετήθηκε η επίδραση του πλήθους των υπολογιστικών σωματιδίων που μοντελοποιούν τη στερεά φάση. Επιπλέον, διερευνήθηκε η επίδραση των συντελεστών βαρύτητας, μέσω των οποίων κατανέμεται η επίδραση των σωματιδίων και πέρα του όγκου ελέγχου στον όποιο

εντοπίζονται, του συντελεστή αποκατάστασης σωματιδίων-τοιχώματος καθώς και του μοντέλου της κινητικής θεωρίας των κοκκωδών ροών (KTGF). Για τη πρώτη παράμετρο διαπιστώθηκε ότι καλύτερα αποτελέσματα προκύπτουν για πλήθος σωματιδίων ίσο με 400000, ωστόσο το πλήθος των σωματιδίων χρίζει μεγαλύτερης διερεύνησης. Από τους διάφορους διαθέσιμους συντελεστές βαρύτητας, ο συντελεστής κατανομής Gauss με παράμετρο  $\alpha=6$  φαίνεται να δίνει καλύτερα αποτελέσματα. Αναφορικά, με το συντελεστή αποκατάστασης, τα αποτελέσματα συνάδουν με τη διεθνή βιβλιογραφία (Li et al., 2012), που μιλά για πολύ μικρή επίδραση του συντελεστή αυτού στις προσεγγίσεις κατά Lagrange. Πάντως, φαίνεται τα καλύτερα αποτελέσματα να παρατηρούνται για χαμηλές τιμές του κάθετου συντελεστή και τιμές κοντά στην μονάδα για τον εφαπτομενικό. Τέλος, η επίδραση των μοντέλων της κινητικής θεωρίας φαίνεται να είναι αμελητέα.

## 6.2. Μελλοντική Εργασία

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η μέθοδος MP-PIC αποτελεί μέχρι στιγμής τη λιγότερο ανεπτυγμένη μέθοδο επίλυσης της ροής από τις τρεις που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο 3. Όμως, έχει προκαλέσει έντονο ενδιαφέρον στην επιστημονική κοινότητα, λόγω των έμφυτων πλεονεκτημάτων που προσφέρει.

Κατά την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας, τα μεγαλύτερα προβλήματα εντοπίστηκαν στην προσπάθεια μοντελοποίησης της κατανομής των σωματιδίων (PSD), καθώς και στην μοντελοποίηση της χημικής αντίδρασης δέσμευσης του CO<sub>2</sub>. Ειδικά, για τη μοντελοποίηση της χημικής αντίδρασης απαιτείται η υλοποίηση UDF, καθότι το ANSYS FLUENT δεν έχει ενσωματωμένη, προς το παρόν, τη δυνατότητα μοντελοποίησης χημικών αντιδράσεων στις διακριτές φάσεις, πέραν της καύσης και της εξάτμισης. Το κύριο πρόβλημα αφορά την ανάγκη μοντελοποίησης σωματιδίων μεταβλητής σύστασης, τα οποία εκ των πραγμάτων πρέπει να διαθέτουν μεταβλητή μάζα.

Αναφορικά με το PSD, η ενσωμάτωση του κρίνεται αναγκαία, διότι αποτελεί ένα από τα κύρια πλεονεκτήματα των μεθόδων Euler-Lagrange, έναντι της TFM (Euler-Euler). Το βασικό πρόβλημα, που παρατηρήθηκε κατά τη προσπάθεια ενσωμάτωσης του στη προσομοίωση της ροής, σχετίζεται με την απαίτηση για σωματίδια μεταβλητής μάζας. Ωστόσο, το πρόβλημα αυτό ίσως μπορεί να αντισταθμιστεί με την εφαρμογή διαφορετικών injections για κάθε διάμετρο.

Ιδιαίτερη μέριμνα πρέπει να δοθεί στην διερεύνηση των αιτιών της πρόλεξης υψηλών τιμών για τις ταχύτητες ολίσθησης, προκειμένου να αντιμετωπιστεί καταλλήλως. Η πρόλεξη τόσο μεγάλων  $u_{slip}$ , είναι πιθανό να οδηγεί σε σημαντικά αριθμητικά σφάλματα και σε άλλα μεγέθη της ροής.

Η περαιτέρω βελτίωση του μοντέλου μπορεί να λάβει χώρα με την ακριβέστερη μοντελοποίηση του μοντέλου οπισθέλκουσας. Συγκεκριμένα, είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον, να χρησιμοποιηθεί η σχέση (3.7) αντί της (3.6). Η πρώτη κάνει χρήση της ταχύτητας του αέριου φάσης στη θέση του σωματιδίου, αντί στο κέντρο του κελιού που χρησιμοποιεί αντίστοιχα η δεύτερη. Η μοντελοποίηση αυτή απαιτεί τη χρήση UDF και ίσως μπορεί να πραγματοποιηθεί με χρήση της κλίσης (gradient) της ταχύτητας.

Επιπλέον μελέτη απαιτείται στην διερεύνηση της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων που εξετάστηκαν στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, όπως επίσης και του χρονικού βήματος και της πυκνότητας πλέγματος. Τέλος, ιδιαίτερα σημαντική είναι η προσομοίωση του πλήρη κύκλου της μονάδας (full loop), ώστε να μελετηθεί η καθολικότητα του μοντέλου.



## 7. Ονοματολογία/Nomenclature

### 7.1. Αγγλικοί Συμβολισμοί

C	Αριθμός Courant
c	Ταχύτητα Τυχαίας Κίνησης Σωματιδίων (m/s) (KTGF)
D	Διάμετρος Κλίνης (m)
D <sub>cl</sub>	Διάμετρος Cluster (m) (EMMS)
d <sub>i</sub>	Αριθμητικός μέσος των οπών δύο διαδοχικών κοσκίνων (m)
d <sub>p</sub>	Διάμετρος Σωματιδίων κατά Sauter (m)
d <sub>p</sub>	Μέση Διάμετρος Sauter (m)
d <sub>p</sub> <sup>*</sup>	Αδιάστατη Διάμετρος
D <sub>t</sub>	Διάμετρος Κλίνης (m) (EMMS)
D <sub>v</sub>	Διάμετρος Φυσαλίδων (void size) (m) (EMMS)
e <sub>ss</sub>	Συντελεστής Αποκατάστασης Σωματιδίων-Σωματιδίων
e <sub>sw,n</sub>	Κάθετος (normal) Συντελεστής Αποκατάστασης Σωματιδίων - Τοιχώματος
e <sub>sw,t</sub>	Εφαπτομενικός (tangential) Συντελεστής Αποκατάστασης Σωματιδίων - Τοιχώματος
f	Κλάσμα Όγκου Στερεάς Φάσης στη Πυκνή Περιοχή (EMMS)
F	Οπισθέλκουσα ανά Μονάδα Όγκου (kg/m <sup>2</sup> s <sup>2</sup> ) (EMMS)
F <sub>b</sub>	Άνωση (N)
F <sub>D</sub>	Οπισθέλκουσα Δύναμη (N)
f <sub>D</sub>	Οπισθέλκουσα Δύναμη ανά Μονάδα Όγκου (N/m <sup>3</sup> )
F <sub>g</sub>	Βαρυτική Δύναμη (N)
F <sub>KTGF</sub>	Μοντελοποίηση Κρούσεων μέσω Κινητικής Θεωρίας (kg/m <sup>2</sup> s <sup>2</sup> )
F <sub>other</sub>	Όλες οι Δυνάμεις σε ένα Σωματίδιο πλην βαρυτικής, οπισθέλκουσας και λόγω κρούσεων (kg/m <sup>2</sup> s <sup>2</sup> )
Fr <sub>p</sub>	Αριθμός Froude σωματιδίου
F <sub>s→g</sub>	Οπισθέλκουσα στην Αέρια Φάση σε Euler-Lagrange (kg/m <sup>2</sup> s <sup>2</sup> )
g	Επιτάχυνση της Βαρύτητας (m/s <sup>2</sup> )
g <sub>0</sub>	Συνάρτηση της Ακτινικής Κατανομής της Στερεάς Φάσης
G <sub>s</sub>	Ρυθμός ανακυκλοφορίας στερεών ανά μονάδα επιφανείας (kg/m <sup>2</sup> sec)
H <sub>d</sub>	Συντελεστής Ανομοιογένειας (EMMS)
Π <sub>dD</sub>	Δεύτερη Αναλλοίωτη της Απόκλισης του Τανυστή του Ρυθμού Παραμόρφωσης (s <sup>-2</sup> )
k <sub>Θs</sub>	Συντελεστής Διάχυσης Κοκκώδους Ενέργειας (kg/m·s)
l <sub>r</sub>	Λόγος Μηκών (m)
m <sub>g</sub>	Μάζα Αέριας Φάσης (kg αερίου)
m <sub>p</sub>	Μάζα Σωματιδίου (kg στερεού)
m <sub>parc</sub>	Μάζα Υπολογιστικού Σωματιδίου (kg)
m <sub>s</sub>	Μάζα Στερεάς Φάσης (kg στερεού)
M <sub>tot</sub>	Συνολική Μάζα Στερεάς Φάσης στη Κλίνη

$M_w$	Μοριακό Βάρος (kg/kgmol)
$N$	Πλήθος Υπολογιστικών Σωματιδίων σε Ολόκληρο το Πεδίο Ροής
$n_p$	Πλήθος Σωματιδίων ανά Υπολογιστικό Σωματίδιο
$N_{st}$	Συναλλασσόμενη Ενέργεια Μεταξύ Αέριας και Στερεάς Φάσης (W/kg) (EMMS)
$n_T$	Πλήθος Υπολογιστικό Σωματίδιο στο Κελί
$p$	Πίεση (N/m <sup>2</sup> )
$P_{fr}$	Πίεσης Τριβής Σωματιδίων (Pa)
$P_{op}$	Πίεση Λειτουργίας (Pa)
$p_s$	Κοκκώδης Πίεση (N/m <sup>2</sup> )
$R$	Παγκόσμια Σταθερά των Αερίων (J/gmolK)
$Re_p$	Αριθμός Reynolds σωματιδίου
$S_f$	Συντελεστής Ασφαλείας
$T$	Θερμοκρασία (K)
$u$	Πραγματική Ταχύτητα Αέριας Φάσης (m/s)
$U_g$	Φαινόμενη Ταχύτητα Αέριας Φάσης (m/s)
$U_{mb}$	Ελάχιστη Αναβράζουσα Ταχύτητα (m/s)
$U_{mf}$	Ελάχιστη Ταχύτητα Ρευστοποίησης (m/s)
$U_o$	Φαινόμενη Ταχύτητα Στερεάς Φάσης (m/s)
$u_s$	Πραγματική Ταχύτητα Στερεάς Φάσης/Σωματιδίου (m/s)
$U_s$	Φαινόμενη Ταχύτητα Στερεάς Φάσης (m/s) (EMMS)
$u_{slip}$	Ταχύτητα Ολίσθησης (m/sec)
$u_{sr}$	Ταχύτητα Αναβράζουσας Κλίνης Μεγάλων Φυσαλίδων (m/s) (EMMS)
$U_t$	Τερματική Ταχύτητα (m/s)
$u_t$	Τερματική Ταχύτητα (m/s)
$u_t^*$	Αδιάστατη Τερματική Ταχύτητα
$V_{cell}$	Όγκος Ελέγχου/Κελιού (m <sup>3</sup> )
$V_g$	Όγκος Αέριας Φάσης (m <sup>3</sup> αερίου)
$V_p$	Υδροδυναμικός Περικλείων Όγκος (m <sup>3</sup> στερεού)
$V_{parc}$	Όγκος Υπολογιστικού Σωματιδίου (m <sup>3</sup> )
$V_s$	Όγκος Στερεάς Φάσης (m <sup>3</sup> στερεού)
$w$	Συντελεστής Βαρύτητας (Kernel)
$x_i$	Κλάσμα μάζας δείγματος μεταξύ των προηγούμενων κοσκίνων (kg/kg)
$x_{node}$	Διάνυσμα Θέσης Κόμβων Πλέγματος
$x_p$	Διάνυσμα Θέσης Σωματιδίων (m)
$Y$	Κλάσμα Μάζας (kg συστατικού/kg μίγματος)
$z$	Ύψος (m)

## 7.2. Ελληνικοί Συμβολισμοί

$\alpha$	Επιτάχυνση (m/s <sup>2</sup> )
$\beta$	Συντελεστής Εναλλαγής Ορμής (kg/m <sup>3</sup> s)
$\gamma_{\Theta s}$	Συντελεστής Καταστροφής Ενέργειας λόγω Κρούσεων (kg/ms <sup>3</sup> )
$\Delta t$	Χρονικό Βήμα (s)



$\Delta Z_{\min}$	Μικρότερη Διάσταση Υπολογιστικού Κελιού (m)
$\varepsilon_{fr}$	Ελάχιστο $\varepsilon_s$ για την Ανάπτυξη Δυνάμεων Τριβής στα Σωματίδια
$\varepsilon_g$	Κλάσμα Όγκου Αέριας Φάσης ( $m^3$ αερίου/ $m^3$ )
$\varepsilon_s$	Κλάσμα Όγκου Στερεάς Φάσης ( $m^3$ στερεού/ $m^3$ )
$\varepsilon_{s,max}$	Μέγιστο Κλάσμα Όγκου της Στερεάς Φάσης ( $m^3$ στερεού/ $m^3$ )
$\Theta_s$	Κοκκώδης Θερμοκρασία ( $m^2/s^2$ )
$\lambda_s$	Συστολική Συνεκτικότητα ( $kg/m \cdot s$ )
$\mu$	Διατμητική Συνεκτικότητα ( $kg/m \cdot s$ )
$\mu_{s,col}$	Προσक्रουστική Συνεκτικότητα ( $kg/m \cdot s$ )
$\mu_{s,fr}$	Τριβική Συνεκτικότητα ( $kg/m \cdot s$ )
$\mu_{s,kin}$	Κινητική Συνεκτικότητα ( $kg/m \cdot s$ )
$\nu_g$	Κινηματικό Ιξώδες Αέριας Φάσης ( $m^2/s$ )
$\xi$	Συμβολισμός Μεταβλητής
$\rho_b$	Φαινόμενη Πυκνότητα Στερεάς Φάσης ( $kg/m^3$ κελιού)
$\rho_g$	Πυκνότητα Αέριας Φάσης ( $kg/m^3$ αερίου)
$\rho_{mat}$	Πυκνότητα Στερεού Υλικού ( $kg/m^3$ στερεού)
$\rho_s$	Πυκνότητα Σωματιδίου ( $kg/m^3$ στερεού)
$\sigma_\varepsilon$	Τυπική Απόκλιση Κλάσματος Όγκου στη Πυκνή Περιοχή (EMMS)
$\tau$	Τανυστής Ιξωδών Τάσεων ( $N/m^2$ )
$\tau_p$	Χρόνος Χαλάρωσης Σωματιδίου (s)
$\varphi$	Σφαιρικότητα
$\varphi_{fr}$	Γωνία Εσωτερικής Τριβής (rad)

### 7.3. Δείκτες

c	Πυκνή Περιοχή (EMMS)
f	Αραιή Περιοχή (EMMS)
g	Αέρια Φάση
i	Διεπιφάνεια (EMMS)
mb	Εμφάνιση Πρώτης Φυσαλίδας
mf	Έναρξη Ρευστοποίησης
p	Σωματίδιο (Κόκκος)
pc	Σωματίδιο-Πυκνή Περιοχή (EMMS)
pf	Σωματίδιο-Αραιή Περιοχή (EMMS)
s	Στερεά Φάση

### 7.4. Συντομογραφίες

BFB	Bubble Fluidized Bed
CFB	Circulating Fluidized Bed
CFD	Computational Fluid Dynamics
DDPM	Dense Discrete Phase Model
DEM	Discrete Element Method
DFB	Dual Fluidized Bed
DPM	Discrete Phase Model

EMMS	Energy-Minimization Multi-Scale
FCC	Fluid Catalytic Cracking
FFB	Fast Fluidized Bed
KTGF	Kinetic Theory of Granular Flows
MP-PIC	Multiphase Particle-In-Cell
PC	Pulverized Coal
PSD	Particle Size Distribution
TFM	Two Fluid Model
UDF	User-Defined Function

## 8. Βιβλιογραφία

Adamczyk, W. et al., 2013. Comparison of the standard euler-euler and hybrid euler-lagrange approaches for modeling particle transport in a pilot-scale circulating fluidized bed. *Particuology* 15, pp.129-37.

Alobaid, F., 2015. An offset-method for Euler-Lagrange approach. *Chemical Engineering Science* 138, in press, 18 August.

Alobaid, F., Ströhle, J. & Epple, B., 2013. Extended CFD/DEM model for the simulation of circulating fluidized bed. *Advanced Powder Technology* 24, pp.403-15.

Andrews, M.J. & O'Rourke, P.J., 1996. The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow* 22, pp.379-402.

ANSYS Inc., 2012a. *ANSYS FLUENT User's Guide*. 145th ed. Canonsberg, Pennsylvania, USA.

ANSYS Inc., 2012b. *ANSYS FLUENT Theory Guide*. 145th ed. Canonsburg, Pennsylvania, USA.

Apte, S.V., Mahesh, K. & Lundgren, T., 2008. Accounting of finite-size effects in simulations of dispersed particle-laden flows. *International Journal of Multiphase Flow* 34, pp.260-71.

Basu, P., 2006. *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. Taylor & Francis Group, LLC.

Benyahia, S. & Sundaresan, S., 2011. Do we need sub-grid scale corrections for both continuum and discrete gas-particle flow models? *Powder Technology* 220, pp.2-6.

Charitos, A. et al., 2010. Hydrodynamic analysis of a 10kWth calcium looping dual fluidized bed for post-combustion CO<sub>2</sub> capture. *Powder Technology*, pp.117-27.

CPFD Software LLC, n.d. *Barracuda*. [Online] Available at: <http://cpfd-software.com/> [Accessed 27 Αυγούστος 2015].

Cundall, P.A. & Strack, O.D.L., 1979. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique* 29, pp.47-65.

Dartevelle, S., 2003. *Numerical and Granulometric Approaches to Geophysical Granular Flows*. Michigan Technological University, USA.

Ergun, S., 1952. Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress* 48, pp.89-94.

- Ferziger, J. & Peric, M., 1999. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Berlin, Heidelberg: Springer.
- Geldart, D., 1973. Types of gas fluidization. *Powder Technology*, pp.285-92.
- Gevrin, F., Masbernat, O. & Simonin, O., 2008. Granular pressure and particle velocity fluctuations prediction in liquid fluidized beds. *Chemical Science* 63, pp.2450-64.
- Ge, W. et al., 2008. Meso-scale Structure - A challenge of Computational Fluid Dynamics for Circulating Fluidized Bed Risers. In *Proceedings of the 9th International Conference on Circulating Fluidized Beds*. Hamburg, 2008.
- Gidaspow, D., 1994. *Multiphase Flow and Fluidization*. Academic Press. New York.
- Gidaspow, D., Bezburuah, R. & Ding, J., 1992. Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds, Kinetic Theory Approach. In *Fluidization VII, Proceedings of the 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization.*, 1992.
- Glicksman, L.R., 2003. Fluidized Bed Scaleup. In W.-C. Yang, ed. *Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems*. New York: Marcel Dekker Inc. Ch. 13. pp.337-72.
- Glicksman, L.R., Westphalen, D., Brereton, C.M.H. & Grace, J.R., 1991. Verification of the scaling laws for circulating fluidized beds. In Basu, P., Horio, M. & Hasatani, M. *Circulating Fluidized Bed Technology III*. Oxford: Pergamon Press. pp.119-24.
- Grace, J.R., Bi, H. & Golriz, M., 2003. Circulating Fluidized Beds. In W.-C. Yang, ed. *Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems*. Marcel Dekker Inc. Ch. 19. pp.479-538.
- Haider, A. & Levenspiel, O., 1989. Drag coefficient and terminal velocity of spherical and non-spherical particles. *Powder Technology* 58, pp.63-70.
- Hartge, E.U., Ratsschow, L., Wischnewski, R. & Werther, J., 2009. CFD-Simulation of a circulating fluidized bed riser. *Particuology* 7, pp.283-96.
- Hiltunen, M. & Tang, J.T., 1988. NO<sub>x</sub> abatement in Ahlstrom pyropower circulating fluidized bed boilers. In Basu, P. & Large, J.F. *Circulating Fluidized Bed Technology II*. Oxford: Pergamon Press. pp.429-36.
- Kakaras, E., Grammelis, P., Panopoulos, K. & Nikolopoulos, A., 13 March 2009. *CFB applications in the coal sector - The experience with Greek lignite*. Athens, Greece.
- Kaufmann, A., Moreau, M., Simonin, O. & Helie, J., 2008. Comparison between Lagrangian and mesoscopic Eulerian modelling approaches for inertial particles

suspended in decaying isotropic turbulence. *Journal of Computational Physics* 277, pp.6448-72.

Kullendorff, A., Herstead, S. & Andersson, C., 1988. Emission control by combustion in circulating fluidized bed - operating experiences. In Basu, P. & Large, J.F. *Circulating Fluidized Bed Technology II*. Oxford: Pergamon Press. pp.445-56.

Kunii, D. & Levenspiel, O., 1990. *Fluidization Engineering*. 2nd ed. Butterworth-Heinemann.

Li, F. & Kwauk, M., 1994. *Particle-Fluid Two-Phase Flow: The Energy-Minimization Multi-Scale Method*.

Li, F. et al., 2012. MP-PIC simulation of CFB riser with EMMS-based drag model. *Chemical Engineering Science*, Volume 82 (12), pp.104-13.

Lun, C.K.K., Savage, S.B., Jeffrey, D.J. & Chepur, N., 1984. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *Journal of Fluid Mechanics* 140, pp.223-56.

Lu, B., Wang, W. & Li, J., 2009. Searching for a mesh-independent sub-grid model for CFD simulation of gas-solid riser flows. *Chemical Engineering Science* 64, pp.3437-47.

Nikolopoulos, A. et al., 2010b. An advanced EMMS scheme for the prediction of drag coefficient under a 1.2 MWth CFBC isothermal flow - Part II: Numerical Implementation. *Chemical Engineering Science* 65, pp.4089-99.

Nikolopoulos, A. et al., 2014. A decoupled approach for NO<sub>x</sub>-N<sub>2</sub>O 3-D CFD modeling in CFB plants. *FUEL* 115, January. pp.401-15.

Nikolopoulos, A. et al., 2010a. An Advanced EMMS Scheme for the prediction of drag coefficient under a 1.2MWth CFBC isothermal flow - Part I: Numerical Formulation. *Chemical Engineering Science* 65, pp.4080-88.

Nikolopoulos, A. et al., 2009. Numerical investigation of 3-D transient combustion flow in a 1.2 MWth pilot plant. In *20th International Conference on Fluidized Bed Combustion*. China, 2009.

O'Rourke, P.J. & Snider, D.M., 2012. Inclusion of collisional return-to-isotropy in the MP-PIC method. *Chemical Engineering Science* 80, pp.39-54.

Patankar, N.A. & Joseph, D.D., 2001. Modeling and numerical simulation of particulate flows by the Eulerian-Lagrangian approach. *International Journal of Multiphase Flow* 27, pp.1659-84.

Salvador, C., Lu, D., Anthony, E.J. & Abanades, J.C., 2003. Enhancement of CaO for CO<sub>2</sub> capture in a FBC environment. *Chemical Engineering Journal*, pp.187-95.

- Shimizu, T. et al., 1999. A Twin Fluid-Bed reactor for removal of CO<sub>2</sub> from combustion processes. *Chemical Engineering Research and Design*, pp.62-68.
- Snider, D.M., 2001. An incompressible three-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows. *Journal of Computational Physics* 170, pp.523-49.
- Snider, D.M., O'Rourke, P.J. & Andrews, M.J., 1997. *An Incompressible Two-Dimensional Multiphase Particle-In-Cell Model for Dense Particle Flows; LA-13280-MS, UC-700*. Los Alamos: National Laboratory.
- Soong, C., Tuzla, K. & Chen, J., 1995. Experimental Determination of Cluster Size and Velocity in Circulating Fluidized Beds, Fluidization VIII. In *Engineering Foundation*. New York, 1995.
- Ströhle, J. et al., 2014. Carbonate looping experiments in a 1 MWth pilot plant and model validation. *Fuel* 127, pp.13-22.
- Subbarao, D., 2010. A model for cluster size in risers. *Powder Technology* 199, pp.48-54.
- Sundaresan, S., 2011. Reflections on Mathematical Models and Simulation of Gas-Particle Flows. In *10th International Conference on Circulating Fluidized Beds and Fluidization Technology - CFB-10.*, 2011.
- Syamlal, M. & O' Brien, T., 1987. *Derivation of a Drag Coefficient from Velocity-Voidage Correlation*. Morgantown, West Virginia: U.S. Dept. of Energy, Office of Fossil Energy.
- Van Wachem, B.G.M. et al., 2001. Comparative analysis of CFD models of dense gas-solid systems. *AIChE Journal* 47, pp.1035-51.
- Wadell, H., 1933. Sphericity and roundness of rock particles. *Journal of Geology*, pp.310-31.
- Wang, J., Ge, W. & Li, J., 2008. Eulerian simulation of heterogeneous gas-solid flows in CFB risers: EMMS-based sub-grid scale model with a revised cluster description. *Chemical Engineering Science* 63, pp.1553-71.
- Wen, C.Y. & Yu, Y.H., 1966. Mechanics of Fluidization. *Chemical Engineering Progress Symposium Series* 62, pp.100-11.
- Xie, N., Battaglia, F. & Pannala, S., 2008. Effects of using two- versus three-dimensional computational modeling of fluidized beds: Part I, hydrodynamics. *Powder Technology* 182, pp.1-13.
- Xiong, Q. et al., 2010. Direct numerical simulation of sub-grid structures in gas-solid flow - GPU implementation of macro-scale pseudo-particle modeling. *Chemical Engineering Science* 65, pp.5356-65.

Yang, W.-C., 2003. Particle Characterization and Dynamics. In Yang, W.-C. *Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems*. Marcel Dekker Inc. Ch. 1. pp.1-27.

Zeneli, M. et al., 2014. Numerical simulation of a slugging FB gasifier hydrodynamics, using DDPM, DEM and TFM approaches. In *CFB-11 Conference*. Beijing, China, 2014.

Zeneli, M. et al., 2015. Application of an advanced coupled EMMS-TFM model to a pilot scale CFB carbonator.

Zhang, Y., Ge, W., Wang X. & Yang, C., 2011. Validation of EMMS-based drag model using Lattice Boltzmann simulations on GPUs. *Particuology* 9, pp.365-73.

Ατσόνιος, Κ., 2010. *Υπολογιστική Διερεύνηση της Ισοθερμοκρασιακής Ροής σε Ρευστοποιημένη Κλίνη Ανακυκλοφορίας*. Διπλωματική Εργασία. Αθήνα: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.

Κακαράς, Ε. & Καρέλλας, Σ., 2013. *Αντιρρυπαντική Τεχνολογία Θερμικών Σταθμών*. Αθήνα, Ελλάδα: Εκδόσεις ΤΣΟΤΡΑΣ.

Νικολόπουλος, Α.Π., 2014. *Μελέτη και Μοντελοποίηση Διεργασιών Πολυφασικών Ροών με Εφαρμογή στις Ρευστοποιημένες Κλίνες για τη Δέσμευση Ρυπαντών*. Διδακτορική Διατριβή. Αθήνα: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.

Παπαγεωργίου, Ν., 1991. *Ατμοπαραγωγοί II - Εμβάθυνση*. 1st ed. Αθήνα: Εκδόσεις Συμεών.

Παπαϊωάννου, Ά.Θ., 2002a. *Μηχανική των Ρευστών, Τόμος I*. 2nd ed. Αθήνα: Εκδόσεις ΚΟΡΑΛΙ.

Παπαϊωάννου, Ά.Θ., 2002b. *Μηχανική των Ρευστών, Τόμος II*. 2nd ed. Αθήνα: Εκδόσεις ΚΟΡΑΛΙ.