

key words

Asphaltene Particles
Agglomeration
Fragmentation
Discrete Element Method
Computational Fluid
Dynamics

Modeling of asphaltene particle size distribution in well using DEM-CFD

Hadi Bagherzadeh¹, Zahra Mansourpour^{2*}, Bahram Dabir³

1 Ph.D., Petroleum Engineering Department, Amirkabir University of
Technology

2 Assistant Professor, School of Chemical Engineering, College of
Engineering, University of Tehran

3 Professor, Chemical Engineering Department, Amirkabir University
of Technology

Abstract

Research subject: In the present study, the agglomeration and fragmentation of asphaltene particles have been simulated in laminar using the simultaneous coupling of Discrete Element method (DEM) and Computational Fluid Dynamics (CFD).

Research approach: A new coalescence model based on a common energy

balance is adopted for the attachment of colliding asphaltene particles according to the nature of asphaltene. In this work, straining and shearing modes are considered in the fragmentation process. Straining and shearing are related to the normal and tangential components of the force exerted on the floc respectively. Asphaltene flocs have been considered as irregular shape rigid object.

Main results: Particle collisions and collision efficiency as well as the fragmentation of asphaltene flocs have been studied in details. Furthermore, the asphaltene particles growth and change in particle size distribution along with average fractal dimension changes have been investigated. During the flocculation of the asphaltene particles, the asphaltene particles grow slowly in the initial times. It can be explained by the agglomeration of primary particles and the formation of asphaltene flocs. In the middle time period, due to the collision of the flocs and the formation of large flocs, the growth of the asphaltene particles increase. At the late times, the fragmentations limit the floc growth, and eventually asphaltene particle size approximately reaches a constant value in the steady state. The lognormal distribution provides the best fit for the asphaltene PSDs which, according to previous studies, is also consistent with the nature of asphaltene. The results of proposed collision and fragmentation kernels based on simulation results are agreed well with previous studies.

*To whom correspondence should be addressed:
mansourp@ut.ac.ir

مدل سازی توزیع اندازه ذرات آسفالتین در چاه با استفاده از روش
DEM-CFD

هادی باقرزاده^۱، زهرا منصورپور^{۲*}، بهرام دبیر^۳

۱ دکتری، دانشکده مهندسی نفت، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

۲ استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تهران

۳ استاد، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

فصلنامه علمی - پژوهشی بین رشته ای

سال چهارم، شماره ۲، نسخه ۱

تابستان ۱۳۹۹، صفحه ۸۲-۶۹

چکیده

در پژوهش حاضر، تجمع و شکست ذرات آسفالتین با استفاده همزمان از دو روش اجزای گسسته و دینامیک سیالات محاسباتی در جریان آرام شبیه سازی شده است. با توجه به ماهیت آسفالتین، مدل جدید تجمع برای مدلسازی فرایند چسبیدن ذرات آسفالتین بر اساس ساختار واقعی کلوخه ها پیشنهاد شده است. در این مطالعه، مدل جدیدی بر اساس موازنه انرژی‌های برهم کنش بین ذرات برای چسبیدن ذرات آسفالتین برخورد کننده به یکدیگر، ارائه شده است. شکست کلوخه‌های آسفالتین نیز بر پایه محاسبه نیروهای هیدرودینامیکی در هر یک از پیوندهای بین ذرات اولیه تشکیل دهنده کلوخه در نظر گرفته شده است. کلوخه های تشکیل شده بر اساس شکل واقعی خود در پدیده های تجمع و شکست دنبال می‌شوند. برخورد ذرات، بازده برخورد و شکست کلوخه‌های آسفالتین به صورت دقیق مطالعه شده‌اند. همچنین، رشد ذرات آسفالتین و تغییرات توزیع اندازه ذرات به همراه تغییرات ساختار کلوخه‌ها بررسی شده است. در طول فرایند توده‌ای شدن ذرات آسفالتین، در بازه زمانی اولیه رشد اندازه ذرات کم است که دلیل آن تجمع ذرات اولیه و شکل گیری کلوخه‌های کوچک است. در بازه زمانی میانی به علت برخورد کلوخه‌ها و تشکیل کلوخه‌های بزرگ، رشد اندازه ذرات شدت می‌گیرد و در بازه انتهایی، شکست کلوخه‌ها رشد بیشتر آن‌ها را محدود می‌سازد و نهایتاً به حالت پایا می‌رسد. توزیع لگاریتمی نرمال بهترین مطابقت را با نتایج توزیع اندازه ذرات نشان می‌دهد که بر اساس مطالعات قبلی با طبیعت آسفالتین نیز هماهنگی دارد. بر اساس نتایج شبیه سازی، کرنل برخورد و شکست و بعد فرکتال به طور مستقیم محاسبه شد که با نتایج کرنل برخورد و شکست در مراجع پیشین همخوانی دارد.

کلمات کلیدی

ذرات آسفالتین

تجمع

شکست

روش اجزای گسسته

دینامیک سیالات محاسباتی

*عهده دار مکاتبات:

mansourp@ut.ac.ir

۱ مقدمه

تشکیل و نشست آسفالتین یکی از مشکلات اساسی حل نشده تضمین جریان (Flow assurance) در صنعت نفت است که ممکن است در هر نقطه از سامانه تولید، مخزن و لوله‌های جریان تا تفکیک‌گر رخ دهد. این مسئله یکی از پرهزینه‌ترین مشکلات عملیاتی است. نشست آسفالتین می‌تواند منجر به آسیب سازند و از دست دادن تولید به دلیل انسداد خطوط جریانی زیرسطحی و سطحی شود. هرگونه تغییر در شرایط ترمودینامیکی نظیر تغییر دما، فشار و تغییر ترکیب نفت می‌تواند تعادل ترمودینامیکی آسفالتین در نفت را بر هم زند و سبب تغییر فاز آسفالتین از حالت محلول به حالت جامد شود. اندازه ذرات در این مرحله در حدود ۳۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر است و اصطلاحاً به آن‌ها ذرات اولیه اطلاق می‌شود [۱]. ذرات اولیه به یکدیگر می‌چسبند و کلوخه‌هایی با اندازه بزرگ‌تر را تشکیل می‌دهند. علاوه بر این ممکن است این کلوخه‌ها در اثر نیروهای هیدرودینامیکی ناشی از جریان سیال به کلوخه‌های کوچک‌تر تبدیل شوند. پدیده‌های تجمع و شکست از این جهت اهمیت دارند که توزیع اندازه ذرات آسفالتین در جریان سیال، ناشی از آن‌ها است. از سوی دیگر، رفتار نشست آسفالتین بر سطح در چاه یا خطوط جریانی به اندازه ذرات آسفالتین بستگی دارد. از این رو مطالعه توزیع اندازه ذرات آسفالتین طی سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته است.

مطالعات آزمایشگاهی بر روی پدیده‌های تجمع و شکست ذرات آسفالتین و تأثیر آن بر توزیع اندازه ذرات در شرایط جریانی با استفاده دستگاه کوئیت (Couette device) انجام شده است [۲-۵]. نتایج این مطالعات نشان می‌دهند در ابتدا، اندازه کلوخه‌های آسفالتین تا رسیدن به مقدار بیشینه افزایش و سپس تا رسیدن به حالت پایدار کاهش می‌یابد. در این مطالعات اثر نرخ برشی، غلظت ذرات اولیه آسفالتین و نسبت تولوئن به نرمال هپتان نیز بررسی شده است. به منظور مدل‌سازی پدیده‌های مذکور و محاسبه تغییرات توزیع اندازه ذرات آسفالتین با زمان معمولاً از معادلات بیلان جمعیت (Population Balance Equations) استفاده می‌شود [۳، ۴، ۶-۱۰]. این معادلات نیازمند ثوابتی هستند که به عنوان کرنل‌های برخورد و شکست شناخته می‌شوند و در حال حاضر، این کرنل‌ها بر اساس مجموعه‌ای از روابط تجربی محاسبه می‌شوند. به منظور بررسی کامل‌تر پدیده‌های تجمع و شکست ذرات آسفالتین و درک بهتر از این پدیده‌ها و همچنین تعیین دقیق کرنل‌های مذکور، شبیه‌سازی عددی در مقیاس میکرو می‌تواند موثر واقع شود. اخیراً شات با استفاده از دیدگاه اوپلری-لاگرانژی، پدیده‌های تجمع، شکست و نشست ذرات آسفالتین را مطالعه نموده است

[۱۱]. نتایج این پژوهش نشان داد کلوخه‌های آسفالتین حاصل دارای ساختاری باز و متخلخل بوده و خواص آن‌ها وابستگی کمی به سازوکارهای شکست و نرخ برشی نشان می‌دهند. با وجود ارزشمند بودن نتایج حاصل از شبیه‌سازی، خصوصیات ذرات آسفالتین و برهم کنش‌های مختص این ذرات در این مطالعه لحاظ نشده است.

پیش‌بینی‌های دقیق از پدیده‌های تجمع، شکست و نشست آسفالتین تا به امروز به عنوان یکی از مسائل نامشخص باقی مانده است. یکی از دلایل این امر را می‌توان عدم شناخت کافی این پدیده‌ها در مقیاس‌های مولکولی و میکروسکوپی بیان کرد. از این رو مطالعه و بررسی پدیده‌های مذکور در مقیاس‌های کوچک‌تر به منظور به دست آوردن درک فیزیکی بهتر آن‌ها امری ضروری به نظر می‌رسد. هدف این مقاله، بررسی جامع پدیده‌های تجمع و شکست ذرات آسفالتین در شرایط جریانی موجود در چاه در مقیاس میکرو با استفاده از دیدگاه روش اجزای گسسته-دینامیک سیالات محاسباتی (Discrete Element Method-Computational Fluid Dynamics (DEM-CFD) است. روش اجزای گسسته به تعیین برخورد بین ذرات آسفالتین و محاسبه نیروهای تماسی دخیل در این برخوردها کمک می‌کند و دینامیک سیالات محاسباتی امکان محاسبه میدان جریان سیال را فراهم می‌سازد.

لذا در این مطالعه، مدل جدیدی بر اساس موازنه انرژی‌های برهم کنش بین ذرات برای چسبیدن ذرات آسفالتین برخورد کننده به یکدیگر، ارائه شده است. شکست کلوخه‌های آسفالتین نیز بر پایه محاسبه نیروهای هیدرودینامیکی در هر یک از پیوندهای بین ذرات اولیه تشکیل دهنده کلوخه در نظر گرفته شده است. کلوخه‌های تشکیل شده بر اساس شکل واقعی خود در پدیده‌های تجمع و شکست دنبال می‌شوند. پدیده‌های برخورد، تجمع و شکست ذرات آسفالتین به صورت جزئی مطالعه شده‌اند و تغییرات اندازه کلوخه‌های آسفالتین و بُعد برخالی (Fractal) آن‌ها با زمان در طول شبیه‌سازی گزارش شده است.

۲ مدل‌سازی عددی

۲-۱ معادلات فاز سیال

معادلات حاکم بر حرکت سیال تراکم‌ناپذیر در حضور ذرات و در جریان آرام به شکل زیر تعریف می‌شوند [۱۲]:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon U_f) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho_f \varepsilon U_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \varepsilon U_f U_f) = -\nabla p - F_p^f + \nabla \cdot (\varepsilon \tau) + \rho_f \varepsilon g \quad (2)$$

می‌کند، از مجموع نیروهای وارده بر ذرات اولیه‌ای که کلوخه را تشکیل داده‌اند، محاسبه می‌شود. در این فرض، اثرات پوششی ذرات اولیه‌ای که در مجاورت هم قرار دارند، لحاظ نشده است. به دلیل تراکم بالای ذرات در درون کلوخه‌ها، در واقعیت، نیروی وارده تأثیر قابل توجهی بر ذرات اولیه دارد. از اینرو نیروی دراگ وارد بر ذرات اولیه تشکیل دهنده و متعاقباً کلوخه بیشتر تخمین زده می‌شود.

۲-۲ معادلات حرکت ذرات اولیه و کلوخه‌ها

حرکت انتقالی و چرخشی ذرات آسفالتین با استفاده از روابط زیر توصیف می‌شود [۱۶]:

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_{cont,i}^n + \vec{F}_{cont,i}^t + \vec{F}_i^f + m_i g \quad (۸)$$

$$\hat{I}_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \sum_{j \in \text{cont}} \vec{r}_{cont} \times \vec{F}_{cont}^t \quad (۹)$$

در این معادلات I_i ، ω_i ، v_i ، m_i به ترتیب جرم، سرعت انتقالی، سرعت چرخشی و ممان اینرسی ذره i است. r_{cont} فاصله محل تماس با مرکز ذره i و F_{cont}^n و F_{cont}^t به ترتیب نیروهای تماسی نرمال، تماسی مماسی و نیروی وارده از طرف سیال بر ذرات است. برای محاسبه نیروهای تماسی نیز یکی از مدل‌های کره نرم (Soft sphere) روش اجزای گسسته به نام مدل فنر-ضربه‌گیر (Spring-dashpot model) به کار گرفته شده است. روابط مربوط به مدل مذکور در جدول ۱

در این روابط، τ ، P ، U_f ، ρ_f به ترتیب چگالی سیال، سرعت سیال، فشار و تانسور تنش گرانیرو سیال و ε تخلخل موضعی است. با توجه به دوبعدی بودن مسئله، این تخلخل بر اساس سطح اشغال شده توسط ذرات، درون سلول سیالی محاسبه می‌شود:

$$\varepsilon_{2D} = 1 - \frac{1}{A_{Cell}} \sum_{i=1}^N \alpha_p^i A_p \quad (۳)$$

از این رو لازم است تا تخلخل دوبعدی به تخلخل سه بعدی تبدیل شود. برای این منظور از رابطه ارائه شده توسط هومانز استفاده شد [۱۳]:

$$\varepsilon_{3D} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi\sqrt{3}}} (1 - \varepsilon_{2D})^{3/2} \quad (۴)$$

نیروی برهم کنش بین سیال و ذرات است که در این مقاله، نیروی دارگ به عنوان تنها نیروی برهم-کنش در نظر گرفته شده است. برای محاسبه نیروی دارگ وارده بر ذرات از رابطه ارگان و ون-یو استفاده شده است [۱۴]:

$$\vec{f}_i = V_p \left(150 \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu_f}{\varepsilon D_p^2} + 1.75 \frac{\rho_f (1-\varepsilon) |\vec{U}_f - \vec{v}_p|}{D_p} \right) (\vec{U}_f - \vec{v}_p), \quad \varepsilon < (\Delta) \quad (۵)$$

$$\vec{f}_i = V_p \left(\frac{\pi}{8} C_D \varepsilon^{-2.65} \rho_f D_p^2 |\vec{U}_f - \vec{v}_p| (\vec{U}_f - \vec{v}_p) \right), \quad \varepsilon \geq \quad (۶)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & , Re_p < 1000 \\ 0.44 & , Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (۶)$$

$$Re_p = \frac{\rho_f \varepsilon D_p |\vec{U}_f - \vec{v}_p|}{\mu_f} \quad (۷)$$

شکل ۱ طرح واره سامانه مورد استفاده برای ایجاد میدان مغناطیسی عمودی

Figure 1 Scheme of the apparatus used to create orthogonal MF

Equation	Term
$\vec{F}_{cont,ij}^n = (-k_n \xi_{n,ij} - \eta_n (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij})) \vec{n}_{ij}$	Contact Force (Normal)
$\vec{F}_{cont,ij}^t = \begin{cases} (-k_t \xi_{t,ij} - \eta_t (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{t}_{ij})) \vec{t}_{ij}, & \vec{F}_{cont,ij}^t \leq \mu_p \vec{F}_{cont,ij}^n \\ -\mu_p \vec{F}_{cont,ij}^n \vec{t}_{ij}, & \vec{F}_{cont,ij}^t > \mu_p \vec{F}_{cont,ij}^n \end{cases}$	Contact Force (Tangential)
$\xi_{n,ij} = (R_i + R_j) - \vec{r}_i - \vec{r}_j $	Normal Overlap
$\vec{n}_{ij} = \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{ \vec{r}_i - \vec{r}_j }$	Unit Normal Vector
$\vec{v}_{ij} = (\vec{v}_i - \vec{v}_j) + (\vec{\omega}_i \times \vec{R}_i - \vec{\omega}_j \times \vec{R}_j)$	Relative Velocity
$\xi_{t,ij} = \xi_{t0,ij} + (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{t}_{ij}) \Delta t_p$	Tangential Overlap

ارائه شده‌اند [۱۷]. در این معادلات، η_n ، k_n ، k_t ، μ_p و η_t به ترتیب گرانیروی ذره، ثابت فنر نرمال، ثابت فنر مماسی، ضریب میرایی نرمال و ضریب میرایی مماسی هستند. با توجه به اینکه شکل واقعی کلوخه‌ها در شبیه سازی

برای محاسبه نیروی دارگ هر سلول سیالی در یک گام زمانی، ابتدا نیروی دارگ وارده بر ذرات درون آن سلول محاسبه شده و سپس این مقادیر با یکدیگر جمع می‌شوند. نیرویی که سیال بر یک کلوخه وارد

انرژی جنبشی نسبی دو ذره برخوردکننده بتواند بر سد دافعه حاکم بین ذرات، غلبه کند. انرژی جنبشی نسبی دو ذره برخوردکننده از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$E_{kin,ij} = \frac{1}{2}(m_i + m_j)(|\vec{v}_i - \vec{v}_j|)^2 \quad (13)$$

۲-۴ مدل شکست کلوخه‌های آسفالتین

به طور کلی برای جسم صلب، چهار حالت اصلی تنش درونی می‌تواند منجر به شکست شود که شامل کشش (straining)، برش (shearing)، پیچش (twisting) و خمش (bending) است [۲۲]. تنش کششی با مولفه نرمال و تنش برشی با مولفه مماسی نیروی وارده بر جسم (یا پیوند) ارتباط دارند. تنش‌های پیچشی و خمشی به ترتیب به مولفه‌های نرمال و مماسی گشتاور القا شده وابسته هستند. در این پژوهش تنش‌های کششی و برشی در شکست کلوخه‌ها لحاظ شده است. تنش‌های درونی در تمامی پیوندهای بین ذرات اولیه موجود در کلوخه با این فرض محاسبه می‌شود که شتاب هر ذره اولیه از معادلات حرکت اجسام صلب کلوخه تبعیت می‌کند (معادله (۱۴)). از سوی دیگر این شتاب بایستی از موازنه نیروهای وارد بر آن ذره منفرد نیز به دست آید؛ از اینرو برای هر ذره اولیه می‌توان معادله (۱۵) را نوشت [۲۳]:

$$\frac{d\vec{v}_p}{dt} = \frac{d\vec{v}_{CG}}{dt} + \frac{d\vec{\omega}_F}{dt} \times \vec{r}_{p-CG} + \vec{\omega}_F \times \frac{d\vec{r}_{p-CG}}{dt} \quad (14)$$

$$\sum \vec{F}_B^p = m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} - \vec{F}_H^p \quad (15)$$

در این روابط، r_{p-CG} فاصله ذره اولیه p از مرکز جرم کلوخه، F_H^p نیروی هیدرودینامیکی وارد بر ذره مذکور و F_B^p بیانگر نیروی پیوندی بین این ذره با سایر ذرات مجاور است که به صورت مجموع بیان شده است. برای کلوخه‌ای متشکل از n ذره اولیه، مجموعه معادلات برای تمام ذرات اولیه منجر به $n-1$ رابطه مستقل برای نیروها در پیوندهای بین ذرات اولیه می‌شود. بنابراین، نیرو در هر یک از پیوندهای بین ذرات اولیه محاسبه می‌شود و نیروی کششی و برشی در پیوندها با محاسبه مولفه‌های نیرو در جهت نرمال و مماسی به دست می‌آید. زمانی پیوند بین ذرات اولیه خواهد شکست که هر یک از مولفه‌های تنش درونی از مقدار آستانه‌ای که برای پیوند بین ذرات در نظر گرفته شده است، بیشتر شده و منجر به ایجاد کلوخه‌های کوچک تر می‌شود. همچنین در هر گام زمانی تنها یک پیوند بین ذرات اولیه در کلوخه خواهد شکست در حالی که ممکن است به طور همزمان شرایط شکست در چندین پیوند کلوخه ایجاد شود، در این حالت، پیوندی که بیشترین تنش بر آن وارد می‌شود (از محل بیشترین تنش وارده) خواهد شکست.

لحاظ شده است، الگوریتم مناسب برای حرکت انتقالی و چرخشی آن‌ها مورد نیاز است. برای این منظور از روش چندکره‌ای (Multi-sphere method) استفاده شده است [۱۸]. در این روش، ذرات با شکل پیچیده به صورت مجموعه‌ای از کره‌ها در نظر گرفته می‌شوند، این کره‌ها می‌توانند اندازه متفاوت داشته و با یکدیگر همپوشانی داشته باشند. تنها نیاز روش چندکره‌ای این است که ذرات اولیه تشکیل دهنده کلوخه، اصولاً مانند جسم صلب حرکت کنند. بنابراین، با محاسبه مرکز جرم کلوخه تشکیل شده، ردیابی کلوخه با استفاده از قوانین دینامیک حرکت جسم صلب صورت می‌گیرد [۱۹]. برای کلوخه a که از تعداد معینی ذره اولیه تشکیل شده است جرم کلوخه (m_a) مرکز جرم (r_{CGa}) بدین ترتیب تعریف می‌شوند:

$$m_a = \sum_{k=1}^N m_{ak} \quad (10)$$

$$\vec{r}_{CGa} = \frac{\sum_{k=1}^N m_{ak} \vec{r}_{ak}}{m_a} \quad (11)$$

در این رابطه، N تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه a و m_{ak} جرم ذره اولیه k و r_{ak} مختصات مرکز ذره اولیه k است.

۲-۳ مدل چسبیدن ذرات آسفالتین

موفقیت چسبیدن بین ذرات برخوردکننده آسفالتین متأثر از نسبت نیروهای دافعه به نیروهای جاذبه است. نیروهای دافعه بین ذرات آسفالتین، مقدار بیشینه محلی در انرژی پتانسیل ایجاد می‌کنند که اصطلاحاً به آن سد دافعه اطلاق می‌شود. برخورد ذرات آسفالتین نیاز به انرژی کافی برای غلبه بر این سد دافعه در طول برخورد دارد، بنابراین همه برخوردها منجر به تجمع نمی‌شوند و در نتیجه بازده برخورد کمتر از یک خواهد بود. بر اساس مطالعه حاجی اکبری و همکاران، سد دافعه به اختلاف پارامترهای حلالیت آسفالتین و محلول به صورت معادله زیر بستگی دارد [۲۰]:

$$\frac{U_{bar}}{K_B T} = \frac{C_1}{(\delta_{asph} - \delta_{sol})^2} + C_2 \quad (12)$$

در این رابطه، U_{bar} سد دافعه، k_B ثابت بولتزمن، T درجه حرارت، δ_{sol} و δ_{asp} پارامترهای حلالیت آسفالتین و محلول و C_1 و C_2 ثوابتی هستند که به صورت آزمایشگاهی تعیین می‌شوند. در مورد نیروهای جاذبه بین ذرات آسفالتین هنوز روابط مشخصی ارائه نشده است و در این زمینه ابهاماتی وجود دارد. از اینرو، دیدگاه ارائه شده توسط هنری و همکاران برای چسبیدن ذرات کلوئیدی بر مبنای موازنه انرژی در این مقاله به کار گرفته شده است [۲۱]. بر اساس این دیدگاه، چسبیدن ذرات آسفالتین برخوردکننده تنها زمانی اتفاق می‌افتد که

هر یک از این سه دسته مطالعه شده است. همچنین شکست کلوخه ها نیز در سه گروه شکست کلوخه های دودزه ای، جدا شدن تک ذره از سطح کلوخه و شکست کلوخه به دو کلوخه کوچک تر مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این، تغییرات اندازه متوسط کلوخه ها، تغییرات بُعد بر خالی متوسط نسبت به زمان مورد بررسی قرار گرفته است. در انتها روابطی برای محاسبه کرنل های برخورد و شکست ارائه شده است.

۳-۱- فرایند کلوخه شدن و رشد ذرات آسفالتین

همان طور که می دانیم مراحل مختلفی در رشد کلوخه های آسفالتین طی فرایند توده ای شدن وجود دارد. در ابتدا تجمع ذرات در فرایند حاکم است. در طول این بازه زمانی اولیه، به دلیل نرخ بالای برخوردهای بین-ذره ای، ذرات به سرعت تجمع می کنند. با رشد کلوخه ها و بزرگ تر شدن آن ها، تنش ناشی از سیال، رشد بیشتر کلوخه ها را به دلیل پدیده شکست محدود می سازد. علاوه بر این نرخ برخورد در کلوخه های بزرگ-تر نیز کم تر است. پس از مدت زمان مشخص، بین تجمع ذرات و کلوخه ها و شکست آن ها تعادلی دینامیک برقرار می شود و در نتیجه سامانه به توزیع اندازه ذره پایدار می رسد. کل فرایند رشد اندازه ذرات آسفالتین می تواند در قالب دو فاز تعریف شود: فاز گذار که در آن اندازه کلوخه تا مقدار بیشینه اولیه افزایش می یابد و فاز حالت پایدار که اندازه کلوخه ها تغییر چندانی نمی کند و صرفاً در محدوده خاصی نوسان می کند. در هر فاز، نرخ توده ای شدن (R_{floc}) می تواند به صورت اختلاف بین نرخ تجمع (R_{agg}) و نرخ شکست (R_{frag}) در نظر گرفته شود:

$$R_{floc} = R_{agg} - R_{frag} = \alpha R_{col} - R_{frag} \quad (16)$$

که در این رابطه R_{col} نرخ برخورد ذرات و α بازده برخورد است. بر اساس این رابطه، زمانی که دو ترم سمت راست با یکدیگر برابر شوند، نرخ توده ای شدن صفر خواهد شد و اندازه متوسط کلوخه ها به مقادیر مشخصی محدود می شود. همچنین رابطه (۱۶) نشان می دهد که نرخ و بازده برخورد ذرات در تعیین نرخ توده ای شدن مهم است. بنابراین در ادامه، نرخ و بازده برخورد ذرات در گروه های مختلف مورد مطالعه دقیق قرار می گیرد. شکل ۱ مراحل مختلف کلوخه شدن ذرات آسفالتین در شبیه سازی های انجام شده را نشان می دهد. در این شکل دامنه محاسباتی شبه دوبعدی با اندازه $0.001 \times 0.001 \times 0.001$ میلی متر است. فاز پیوسته (نفت) و فاز گسسته (ذرات آسفالتین) با تعداد 5000 ، قطر اولیه ذرات 10^{-6} (m)، چگالی 1200 ($kg.m^{-3}$) و گام زمانی 10^{-10} (s) در نظر گرفته شده است. سرعت سیال ورودی 1 m/s است و مدت زمان شبیه سازی 60

۲-۵ شرایط و پارامترهای شبیه سازی

در این پژوهش، کدهای روش اجزای گسسته و دینامیک سیالات محاسباتی با زبان برنامه نویسی فرتن برای سامانه شبه دوبعدی تحت شرایط جریان آرام توسعه داده شده است. ابعاد دامنه محاسباتی $0.001 \times 0.001 \times 0.001$ میلی متر و فاز پیوسته (نفت) با چگالی 607 ($kg.m^{-3}$)، گام زمانی 10^{-7} (s) و گرانیروی $2/4 \times 10^{-4}$ ($kg.m^{-1}$ و s^{-1}) و فاز گسسته (ذرات آسفالتین) با تعداد 5000 ، قطر اولیه ذرات 10^{-6} (m)، چگالی 1200 ($kg.m^{-3}$)، ثابت فنر 800 ($N.m^{-1}$)، ضریب اصطکاک کششی 0.64 ، ضریب ارتجاعی 0.5 و گام زمانی 10^{-10} (s) در نظر گرفته شده است. از آنجایی که پارامترهای شبیه سازی کره نرم برای ذرات آسفالتین نامعلوم است لازم است تا ماده دیگری با پارامترهای معلوم که بیشترین شباهت را به ذرات آسفالتین دارد به عنوان نماینده ذرات آسفالتین انتخاب شود. سیروتا از پلی استیرن به جای آسفالتین در آزمایشات نشست استفاده کرد [۲۴]. بر اساس نظر او، پلی استیرن ها ویژگی های ساختاری یکسانی با آسفالتین ها نشان می دهند. در این مطالعه نیز به دلیل نبود پارامترهای کره نرم برای آسفالتین در شبیه سازی روش اجزای گسسته به عنوان پیش فرض، از خصوصیت های مربوط به پلی استیرن استفاده شده است [۸]. شرایط مرزی برای فاز پیوسته و گسسته در جهت جریان شرط مرزی متناوب لحاظ شده است. بدین معنی که سرعت های سیال در ورودی و خروجی با یکدیگر برابر هستند و همچنین هر ذره ای که از یک طرف دامنه محاسباتی عبور کند به طور خودکار دوباره بر روی مرز مخالف ظاهر می شود و همان مختصات و سرعت در هنگام عبور از مرز را خواهد داشت.

در مرز سمت راست، دیواره قرار دارد که شرط جریان بدون لغزش برای سیال در نظر گرفته شده است و برخورد ذره با دیواره با کمی اصلاحات مانند برخورد ذره-ذره فرض شده است بدین صورت که دیواره مانند یک ذره با شعاع بی نهایت فرض شده است. شرط مرزی تقارن برای مرز سمت چپ انتخاب شده است. در زمان برخورد یک ذره با مرز تقارن، انعکاس ذره از مرز مورد نظر به صورت برخوردی کاملاً کشسان است.

۳ نتایج و بحث

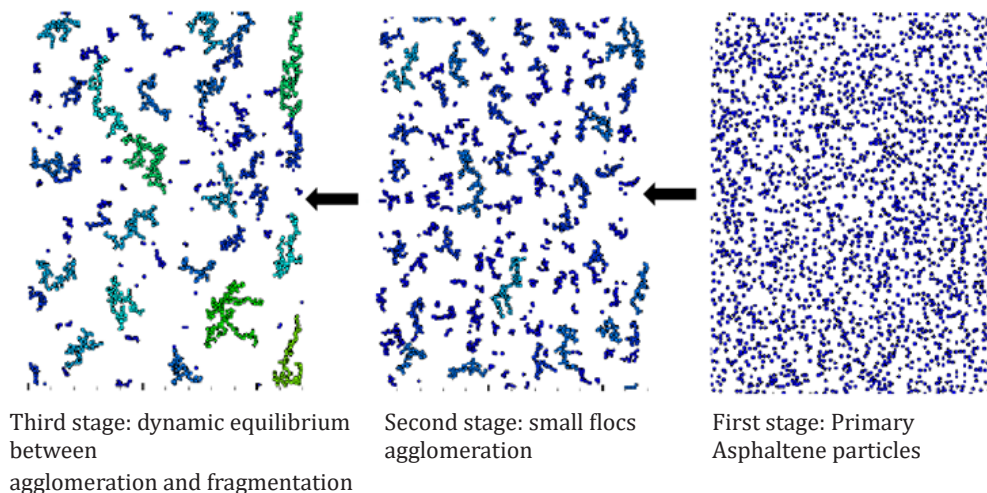
به منظور مطالعه پدیده های تراکم و شکست ذرات آسفالتین، تعداد برخوردها، تجمع ها و شکست ها در فواصل زمانی مشخص به صورت تجمعی ثبت شده است. به منظور مطالعه دقیق تر پدیده های برخورد و چسبیدن ذرات آسفالتین، برخوردها در سه دسته جداگانه شامل برخورد ذرات اولیه با یکدیگر، برخورد ذرات اولیه با کلوخه ها و برخورد کلوخه ها با یکدیگر مورد بررسی قرار گرفته اند و بازده برخورد مربوط به

ثانیه است.

۲-۳ بررسی روند برخوردها، بازده برخورد و شکست کلوخه‌ها

در ابتدای شبیه سازی، تعداد مشخصی از ذرات اولیه در دامنه محاسباتی به صورت تصادفی و به شکلی که همپوشانی نداشته باشند در سامانه قرار داده می‌شوند. با گذشت زمان و برخورد ذرات اولیه با یکدیگر و تشکیل کلوخه‌ها به تدریج از تعداد ذرات اولیه کاسته خواهد شد. از سوی دیگر، ممکن است در اثر شکست کلوخه‌ها، دوباره ذرات اولیه به سامانه باز گردند، از این رو تعداد ذرات اولیه در سامانه هیچگاه به صفر نمی‌رسد و نهایتاً در حالت پایا تقریباً به تعداد مشخصی می‌رسد. شکل ۲-الف)، تغییرات تعداد ذرات اولیه مجزا (N_p) با زمان را نشان می‌دهد. همچنین تغییرات تعداد کلوخه‌های آسفالتین (N_p) با زمان در شکل ۲-ب) نمایش داده شده است. با برخورد ذرات اولیه و به هم چسبیدن آن‌ها، در زمان‌های اولیه تعداد کلوخه‌ها افزایش می‌یابد اما پس از مدتی کلوخه‌های کوچک با هم برخورد کرده

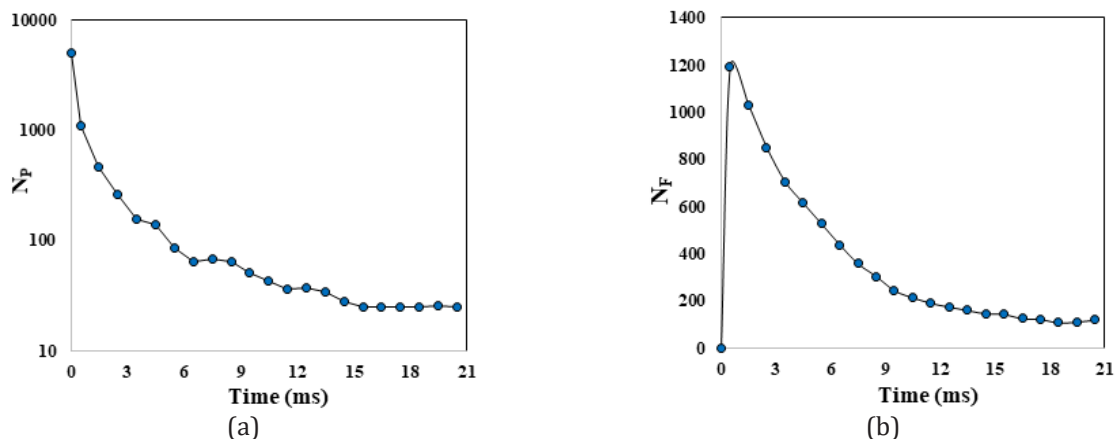
در شکل ۳-د) ارائه شده است. در ابتدا به دلیل وجود ذره آزاد زیاد در سامانه، تعداد برخوردها نیز بالا است ولی به تدریج و با کم شدن ذرات آزاد در سامانه تعداد برخوردها نیز کاهش می‌یابد. تعداد تجمع‌ها نیز روند مشابهی نظیر تعداد برخوردها نشان می‌دهد. در مورد شکست کلوخه‌ها، در ابتدا به دلیل وجود کلوخه‌های کوچک، تعداد شکست‌ها بسیار کم است اما با رشد کلوخه‌ها و بزرگ تر شدن آن‌ها، افزایش می‌یابد. بازده برخورد همواره روند افزایشی را نشان می‌دهد و مقادیر آن از ۰/۵ تا ۰/۶ تغییر می‌کند. همچنین شیب افزایش بازده برخورد در ابتدای فرایند بیشتر است. به منظور مطالعه دقیق‌تر سینتیک رشد کلوخه‌های آسفالتین، برخورد ذرات آسفالتین (شامل ذرات اولیه و کلوخه‌ها) در سه دسته جداگانه شامل برخورد بین ذرات اولیه (برخورد ذره-ذره (P-P collision)، برخورد بین ذرات اولیه و کلوخه‌ها (برخورد ذره-کلوخه P-F collision)) و برخورد بین کلوخه‌ها (برخورد کلوخه-کلوخه (F-F collision)) مورد بررسی قرار گرفته است. تغییرات سهم هر یک از دسته‌های برخورد با زمان



شکل ۱ شبیه سازی مراحل مختلف کلوخه شدن ذرات آسفالتین
Figure ۱ Stages of agglomeration of asphaltene particles

در شکل ۴-الف) نشان داده شده است. در ابتدای فرایند، برخورد ذره-ذره حاکم است و زمانی که کلوخه‌ها تشکیل می‌شوند برخوردهای ذره-کلوخه و کلوخه-کلوخه نیز اهمیت پیدا می‌کنند. با توجه به کاهش تعداد ذرات اولیه در طول فرایند کلوخه‌شدن، سهم برخورد ذره-ذره، نیز به طور پیوسته کاهش می‌یابد و در نهایت در حالت پایا به مقدار کمینه می‌رسد. در برخورد ذره-کلوخه دو رفتار مشاهده می‌شود در زمان‌های اولیه با توجه به افزایش کلوخه‌ها در ابتدا سهم این برخوردها افزایش می‌یابد اما پس از مدتی با توجه به کاهش ذرات اولیه

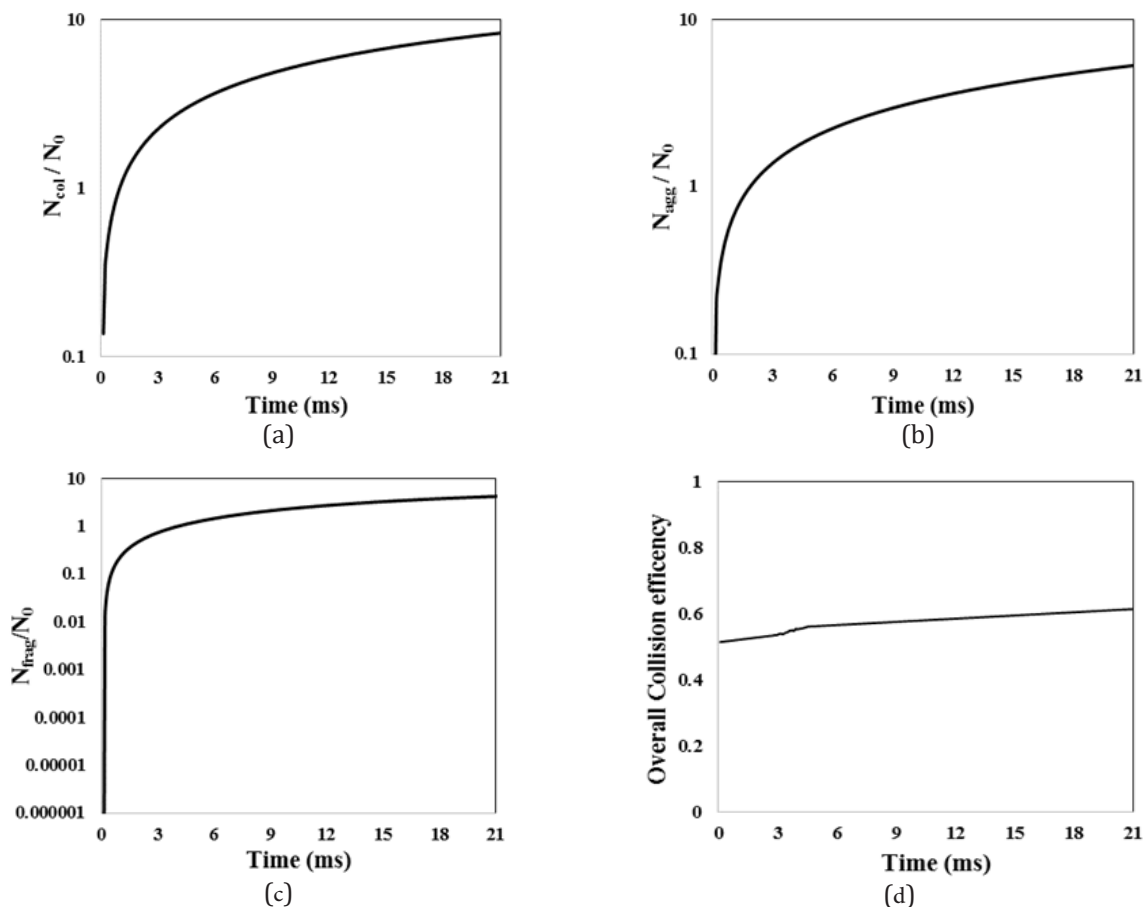
و کلوخه‌های بزرگ تر را تشکیل می‌دهند؛ از اینرو به تدریج میزان کلوخه‌ها کاهش می‌یابد و نهایتاً در حالت پایا تعداد آن‌ها تغییر چندانی نمی‌کند. در مدت شبیه سازی، تعداد کل برخوردها (N_{col})، تجمع‌ها (N_{agg}) و شکست‌ها (N_{frag}) در فواصل زمانی مشخص ثبت شده‌اند. این مقادیر، نسبت به تعداد ذرات اولیه (N_0) سامانه نرمال شده‌اند و تعداد نرمال شده تجمع و شکست‌ها در نمودارهای نیمه لگاریتمی در شکل ۳-الف) تا ج) نمایش داده شده‌اند. علاوه بر این بازده برخورد نیز که از نسبت تعداد تجمع‌ها به برخوردها (N_{agg} / N_{col}) محاسبه شده است،



شکل ۲ تغییرات تعداد الف) ذرات اولیه ب) کلوخه‌های آسفالتین با زمان در طول شبیه سازی
Figure 2 Number of a) initial particles, b) asphaltene flocs versus time

فاکتور دیگری که در طول فرایند کلوخه شدن مورد بررسی قرار گرفته است بازده برخورد مربوط به هر یک از سه دسته برخورد است که در شکل ۴-ب) نشان داده شده است. بازده برخورد ذره-ذره و ذره-کلوخه نسبت به زمان تقریباً ثابت هستند در حالی که بازده برخورد کلوخه-کلوخه با زمان تا رسیدن به حالت پایا افزایش می‌یابد. علت افزایش بازده برخورد

و کلوخه‌ها در سامانه، سهم این برخوردها هم روند کاهشی به خود می‌گیرد. در مورد برخوردهای کلوخه-کلوخه روند، همواره به صورت افزایشی است؛ به این دلیل که از تعداد ذرات اولیه در طول فرایند به تدریج کاسته می‌شود و تعداد کلوخه‌های بیشتری نسبت به ذرات اولیه در سامانه وجود دارد. نهایتاً این برخوردها در حالت پایا به مقدار ثابتی می‌رسند.



شکل ۳ تغییرات الف) تعداد برخوردها ب) تعداد تجمع‌ها ج) تعداد شکست‌ها د) بازده کلی برخورد با زمان
Figure 3 Number of a) collisions, b) flocs, c) fragmentations, d) overall collision efficiency versus time

و شکست کلوخه های دودره ای سهم کم تری را به خود اختصاص داده است. با گذشت زمان و بزرگ شدن کلوخه ها به تدریج سهم شکست مقیاس بزرگ بیشتر می شود و از سهم دو گروه اول کاسته می شود. در حالت پایا، بیشترین سهم به شکست مقیاس بزرگ تعلق دارد و شکست کلوخه های دودره ای کم ترین سهم را دارد؛ چراکه تأثیر نیروهای هیدرودینامیکی بر این کلوخه ها کم تر است.

۳-۳- بررسی تغییرات اندازه ذرات و بُعد بر خالی آسفالتین
 در این پژوهش، اندازه کلوخه های آسفالتین نیز بر اساس شعاع ژیراسیون بیان شده اند. شعاع ژیراسیون R_g برای کلوخه از روابط زیر به دست می آید [۲۵ و ۲۶]:

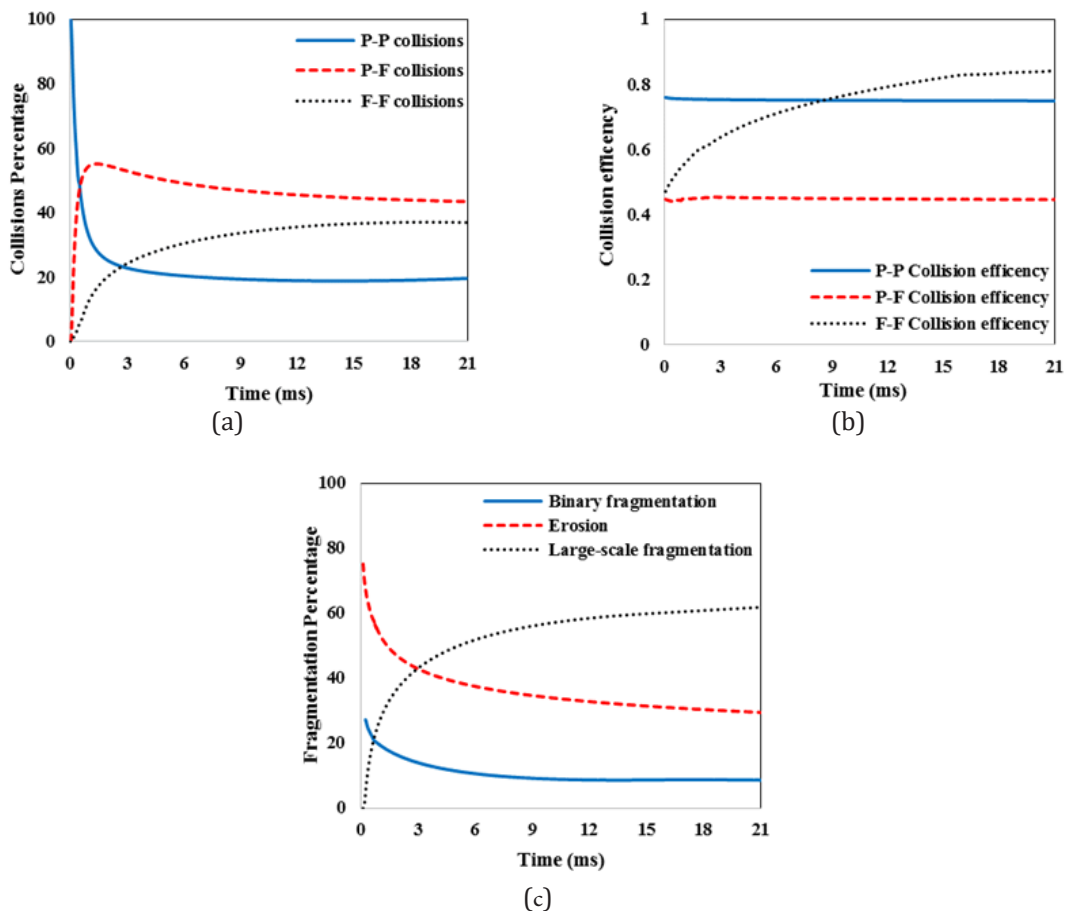
$$R_g^2 = R_{g,p}^2 + \frac{1}{n_p} \sum_{1}^{n_p} (\vec{r}_p - \vec{r}_{CG})^2 \quad (17)$$

$$R_{g,p}^2 = \frac{3}{5} R_p^2 \quad (18)$$

در این رابطه $R_{g,p}$ شعاع ژیراسیون ذره اولیه، n_p تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه، r_p موقعیت ذره اولیه p در کلوخه و r_{CG} موقعیت مرکز جرم کلوخه است.

کلوخه-کلوخه را می توان بزرگ شدن کلوخه ها با زمان و در نتیجه افزایش انرژی جنبشی نسبی برخورد بین کلوخه ها به دلیل افزایش جرم کلوخه های برخورد کننده دانست. با رشد کلوخه ها، جرم کلوخه ها افزایش و متعاقباً سرعت آن ها کاهش می یابد. افزایش انرژی جنبشی نسبی ذرات برخورد کننده با بزرگ شدن کلوخه ها بیانگر آن است که تأثیر افزایش جرم کلوخه بر انرژی جنبشی بیشتر از کاهش سرعت کلوخه است. افزایش بازده کلی برخورد نیز که از برآیند این سه دسته حاصل می شود را می توان به روند افزایشی بازده برخورد کلوخه-کلوخه نسبت داد.

در راستای بررسی جزئی تر پدیده شکست کلوخه ها، این پدیده نیز در سه گروه مجزا مورد مطالعه قرار گرفته است. این سه گروه شامل شکست کلوخه های دو ذره ای (Binary fragmentation)، جدا شدن تک-ذره از سطح کلوخه (فرسایش (Erosion)) و شکست کلوخه به دو کلوخه کوچک تر (شکست مقیاس بزرگ (Large-scale fragmentation)) است. شکل ۴-ج) سهم هر یک از گروه های شکست نسبت به زمان را نشان می دهد. در ابتدای فرایند که هنوز کلوخه ها کوچک هستند جدا شدن تک ذره از سطح کلوخه غالب است



شکل ۴ تغییرات (الف) سهم دسته های مختلف برخورد (ب) بازده برخورد دسته های مختلف شکست نسبت به زمان

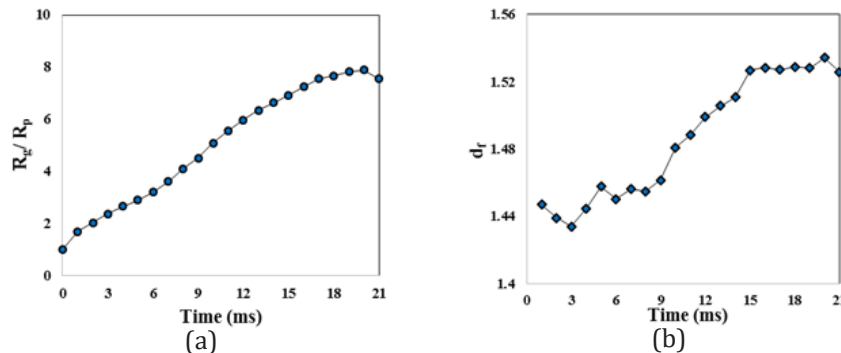
Figure 4 Variation of a) portion, b) efficiency, fragmentation of different categories versus time

حرکت می‌کند. نکته قابل توجه در نتایج به دست آمده، حضور درصد قابل توجهی (حدود ۱۵ درصد) از ذرات آسفالتین با اندازه کوچک در حالت پایا در سامانه است که دلیل آن را می‌توان به جدا شدن ذرات و تشکیل کلوخه‌های کوچک از کلوخه‌های بزرگ به دلیل نیروهای برشی سیال عنوان کرد. از سوی دیگر کلوخه‌های بزرگ، فراوانی زیادی را به خود اختصاص نمی‌دهند چرا که پدیده شکست مانع باقی ماندن کلوخه‌های بزرگ در سامانه می‌شود و نهایتاً درصد فراوانی کلوخه‌های کوچک تر بیشتر می‌شود. چندین تابع توزیع احتمال برای تطابق نتایج توزیع اندازه ذرات آسفالتین مورد ارزیابی قرار گرفت و توزیع لگاریتمی نرمال بهترین مطابقت را با نتایج نشان داد که بر اساس مطالعات قبلی با طبیعت آسفالتین نیز هماهنگی دارد [۲۵، ۶].

۳-۴ بررسی نرخ برخورد و شکست ذرات آسفالتین

نرخ برخورد ذرات به عوامل زیادی نظیر شکل ذرات، توزیع اندازه ذرات و جریان سیال بستگی دارد. نرخ تجمع ذرات علاوه بر موارد مذکور به حرکت نسبی ذرات برخوردکننده و نیروهای بین ذره ای آن‌ها نیز وابسته است. روابط موجود برای کرنل‌های برخورد دارای فرضیات بسیار محدودکننده است که کسر جرمی کم ذرات، کروی بودن آن‌ها و عدم وابستگی به توزیع اندازه ذرات برخی از این فرضیات هستند [۲۸]. در روش اجزای گسسته می‌توان بر بسیاری از این محدودیت‌ها فائق آمد. به طوری که در این روش امکان بررسی ذرات با اشکال دلخواه، چگالی بالای ذرات و برهم کنش‌های بین ذرات و میدان‌های پیچیده جریان وجود دارد. با توجه به شبیه سازی‌های انجام شده می‌توان کرنل برخورد، $C_{i,j}$ ، را به طور مستقیم محاسبه کرد. کرنل برخورد بین ذرات با اندازه i و j از رابطه (۲۰) محاسبه می‌شود [۲۹-۳۱]:

$$C_{i,j} = \frac{N_{col} i_j v_{bed}}{N_{p_i} N_{p_j} t_{sim}} \quad (20)$$



شکل ۵ تغییرات (الف) اندازه متوسط کلوخه و (ب) بعد برخالی متوسط نسبت به زمان
Figure 5 a) mean flocs diameter, b) average fractal dimension versus time

برای محاسبه اندازه متوسط کلوخه‌ها در هر زمان از میانگین‌گیری حسابی نسبت به شعاع ژیراسیون کلوخه‌ها استفاده شده است.

با توجه به ساختار برخالی کلوخه‌های آسفالتین، مشخصه دیگر هر کلوخه آسفالتین، بُعد برخالی (df) (Fractal dimension) آن است که شاخصی از ساختار کلوخه و میزان فشردگی ذرات اولیه در کلوخه است و تعداد ذرات اولیه تشکیل‌دهنده کلوخه را به شعاع ژیراسیون مرتبط می‌سازد [۲۶]:

$$n_p = k \left(\frac{R_g}{R_p} \right)^{df} \quad (19)$$

در این رابطه k ثابت است. برای محاسبه بُعد برخالی متوسط در زمان مشخص، با رسم n_p بر حسب شعاع ژیراسیون برای تمامی کلوخه‌ها در نمودار $\log-\log$ بُعد برخالی متوسط از شیب خط به دست می‌آید.

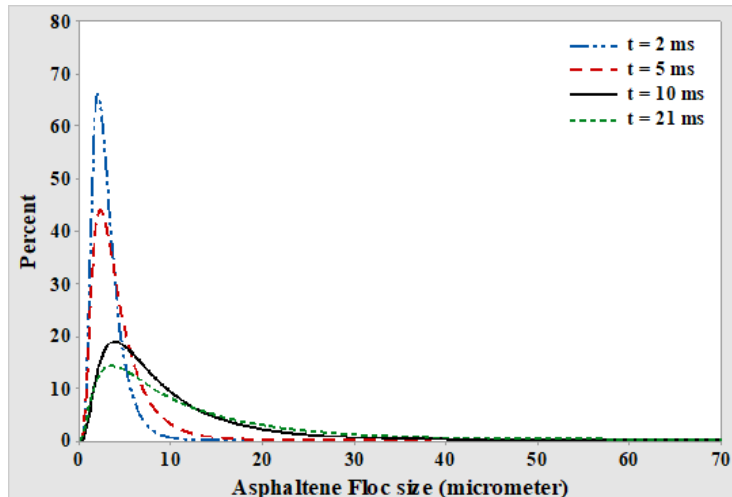
شکل ۵- (الف) و (ب) به ترتیب تغییرات اندازه متوسط کلوخه و بعد برخالی متوسط را در طول شبیه‌سازی نشان می‌دهد. در بازه زمانی اولیه افزایش شعاع متوسط کلوخه‌ها کم است که دلیل آن تجمع ذرات اولیه و شکل‌گیری کلوخه‌های کوچک است. در بازه زمانی میانی به علت برخورد کلوخه‌ها و تشکیل کلوخه‌های بزرگ، رشد اندازه کلوخه‌ها شدت می‌گیرد و در بازه انتهایی شکست کلوخه‌ها رشد بیشتر آن‌ها را محدود می‌سازد و رشد اندازه آن‌ها کم شده و نهایتاً در حالت پایا به مقادیر تقریباً ثابتی می‌رسد. بعد برخالی متوسط کلوخه‌ها نیز در محدوده ۱/۴۲ تا ۱/۵۵ تغییر می‌کند و تا رسیدن به حالت پایا روند افزایشی دارد. مقادیر کوچک بعد برخالی بیانگر ساختارهای باز و متخلخل کلوخه‌های آسفالتین تشکیل شده در سامانه است. بعد برخالی محاسبه شده با مقادیر گزارش شده در مطالعات پیشین همخوانی دارد. [۶ و ۲۵ و ۲۶]

توزیع اندازه ذرات آسفالتین در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی در مرجع [۶] ارائه شده است. همانطور که انتظار می‌رود، توزیع اندازه ذرات آسفالتین طی شبیه‌سازی از اندازه‌های کوچک به سمت کلوخه‌های بزرگ

$$S_T = \frac{1}{t_{sim}} \frac{N_{frag}}{N_F} \quad (23)$$

که N_{frag} تعداد کل شکست و N_F تعداد کلوخه های آسفالتین است. در مقالات گذشته، کرنل شکست برای کلوخه های با ساختار بر خالی به شکل زیر پیشنهاد شده است [۳۱]:

در این رابطه، N_{colij} تعداد کل برخوردها بین ذرات با اندازه i و v_{bed} ، j حجم دامنه محاسباتی، N_{pj} و N_{pi} تعداد ذرات با اندازه i و j و t_{sim} زمان شبیه سازی است. با توجه به اینکه در شبیه سازی های انجام شده، توزیع اندازه ذرات به صورت پیوسته تغییر می کند، کرنل برخورد کلی با استفاده از رابطه زیر محاسبه شده است.



شکل ۶ تغییرات توزیع لگاریتمی نرمال اندازه ذرات آسفالتین در طول شبیه سازی
Figure 6 Normal distribution of asphaltene floc size versus time

$$S_j \propto \left(\frac{R_g}{R_p}\right)^{3d_f} \quad (24)$$

مقادیر کرنل شکست حاصل از شبیه سازی بر حسب شعاع متوسط کلوخه ها در شکل ۸ رسم شده است. بنا بر انتظار، توان به دست آمده در این نمودار بسیار نزدیک به توان رابطه کرنل برخورد کلی بر حسب متوسط تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه است.

۴ نتیجه گیری

در پژوهش حاضر، فرایندهای تجمع و شکست ذرات آسفالتین در شرایط جریانی آرام با استفاده از دیدگاه روش اجزای گسسته-دینامیک سیالات محاسباتی در مقیاس میکرو مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین بر اساس طبیعت آسفالتین، مدلی برای لحاظ کردن چسبیدن ذرات آسفالتین برخوردکننده ارائه شده است. در طول فرایند رشد ذرات، در ابتدا به دلیل حضور تعداد زیاد ذرات آزاد تجمع ذرات آسفالتین در سامانه حاکم است. با رشد کلوخه ها و بزرگ تر شدن آن ها، پدیده شکست اهمیت پیدا کرده و رشد بیشتر را محدود می سازد. نهایتاً پس از مدت زمان مشخص، سامانه در نتیجه تعادل دینامیکی بین تجمع ذرات آسفالتین و شکست آن ها، به حالت پایا می رسد و خواص متوسط سامانه تقریباً ثابت باقی می ماند. سهم برخورد ذرات اولیه با یکدیگر در طول فرایند کلوخه شدن، کاهش می یابد و

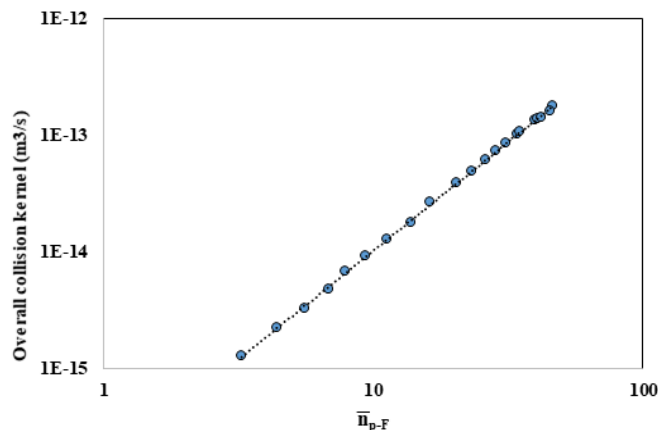
$$C_T = \frac{N_{col} v_{bed}}{N^2 t_{sim}} \quad (21)$$

که در آن، N_{col} تعداد کل برخوردها بین کلوخه های آسفالتین و N تعداد کلوخه های موجود در سامانه است. اغلب کرنل های برخورد پیشنهادی در منابع گذشته نشان از وابستگی این کرنل به تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه ها دارد [۲۹]. از اینرو مقادیر کرنل برخورد کلی بر حسب متوسط تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه n_{p-F} در نمودار لگاریتمی رسم شده و در شکل ۷ نشان داده شده است.

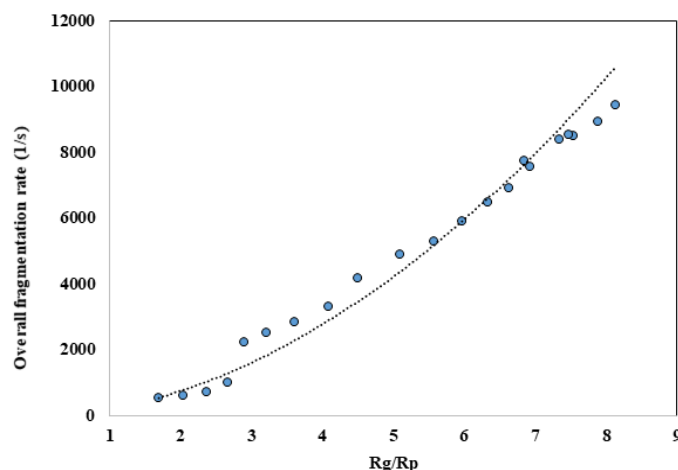
با توجه به این نمودار، کرنل برخورد کلی با متوسط تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه به صورت توانی رابطه دارد. از سوی دیگر، بر اساس رابطه ای که برای کرنل برخورد برای کلوخه های با ساختار بر خالی توسعه داده شده است که به صورت رابطه (۲۲) است [۳۰]، کرنل برخورد با متوسط تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه با توان $(3/df)$ دارای رابطه است. در نتایج شبیه سازی نیز توان به دست آمده با این نسبت هم خوانی بسیار نزدیکی دارد.

$$C_{i,j} \propto (n_{p-F,i} \frac{1}{d_f} + n_{p-F,j} \frac{1}{d_f})^3 \quad (22)$$

بر اساس نتایج شبیه سازی، کرنل شکست کلی، S_p ، به صورت مستقیم و با استفاده از رابطه (۲۳) محاسبه شد:



شکل ۷ مقادیر کرنل برخورد کلی بر حسب متوسط تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه
Figure 7 Overall collision kernel versus initial number of particles in floc



شکل ۸ مقادیر کرنل شکست کلی بر حسب شعاع متوسط کلوخه ها
Figure 8 Overall fragmentation rate versus mean floc diameter

ای به ترتیب سهم کم تری در شکست دارند. طبق انتظار، اندازه متوسط کلوخه‌ها تا زمان رسیدن به حالت پایا افزایش می‌یابد و نهایتاً در این حالت تقریباً ثابت می‌ماند. بُعد برخالی متوسط نیز روند افزایشی نشان می‌دهد. مقادیر کوچک بُعد برخالی بیانگر ساختارهای باز و متخلخل کلوخه‌های آسفالتین تشکیل شده در سامانه هستند. توزیع لگاریتمی نرمال بهترین مطابقت را با توزیع اندازه ذرات آسفالتین در طول شبیه سازی نشان داد. همانطور که انتظار می‌رود توزیع اندازه ذرات آسفالتین از اندازه‌های کوچک به سمت اندازه‌های بزرگ طی شبیه‌سازی حرکت می‌کند. در شبیه سازی‌های انجام شده کرنل برخورد و شکست به طور مستقیم محاسبه شدند. کرنل برخورد کلی با متوسط تعداد ذرات اولیه موجود در کلوخه و کرنل شکست کلی با شعاع متوسط کلوخه‌ها به صورت توانی رابطه دارند.

در نهایت در حالت پایا به مقدار کمینه می‌رسد. سهم برخورد ذرات اولیه و کلوخه‌ها در زمان‌های اولیه افزایش می‌یابد اما پس از مدتی با توجه کاهش ذرات اولیه و کلوخه‌ها در سامانه، روند کاهش به خود می‌گیرد. روند سهم برخورد کلوخه‌ها با یکدیگر همواره به صورت افزایشی است و نهایتاً در حالت پایا به مقدار ثابت می‌رسد. بازده برخورد ذرات اولیه با یکدیگر و ذرات اولیه و کلوخه‌ها نسبت به زمان تقریباً ثابت می‌ماند در حالی که بازده برخورد کلوخه‌ها با یکدیگر تا زمان رسیدن به حالت پایا افزایش می‌یابد. بازده کلی برخورد نیز که از این سه دسته حاصل می‌شود، با زمان تا رسیدن به حالت پایا افزایش می‌یابد. در مورد شکست کلوخه‌ها، در ابتدای فرایند که هنوز کلوخه کوچک است سایش سطح و شکست کلوخه‌های دو ذره‌ای غالب هستند با گذشت زمان و بزرگ شدن کلوخه‌ها به تدریج سهم شکست مقیاس بزرگ بیشتر می‌شود و از سهم دو گروه اول کاسته می‌شود. در حالت پایا، بیشترین سهم به شکست مقیاس بزرگ تعلق دارد و سایش سطحی و شکست کلوخه‌های دو ذره

مراجع

- [1] Vargas, F. M., Garcia-Bermudes, M., Boggara, M., Punnapala, S., Abutaqiya, M., Mathew, N., "On the Development of an Enhanced Method to Predict Asphaltene Precipitation", Proc Annu Offshore Technol Conf, 3: 2301-19, 2014
- [2] Rahmani, N. H. G., Masliyah, J. H., Dabros, T., "Characterization of Asphaltenes Aggregation and Fragmentation in a Shear Field", AIChE J; 49: 1645-55, 2003.
- [3] Rahmani, N. H. G., Dabros, T., Masliyah, J. H., "Evolution of Asphaltene Size Distribution in Organic Solvents under Shear", Chem Eng Sci; 59:685-97, 2004.
- [4] Solaimany-Nazar, A. R., Rahimi, H., "Dynamic Determination of Asphaltene Aggregate Size Distribution in Shear Induced Organic Solvents", Energy and Fuels; 22:3435-42, 2008.
- [5] Solaimany-Nazar, A. R., Rahimi, H., "Investigation on Agglomeration-Fragmentation Processes in Colloidal Asphaltene Suspensions", Energy and Fuels; 23:967-74, 2009.
- [6] Rastegari, K., Svrcek, W. Y., Yarranton, H. W., "Kinetics of Asphaltene Flocculation", Ind Eng Chem Res; 43:6861-70, 2004.
- [7] Rahimi, H., Solaimany-Nazar, A. R., "Asphaltene Aggregates Fractal Restructuring Model, a Population Balance Approach", Energy and Fuels; 24:1088-93, 2010.
- [8] Khoshandam, A., Alamdari, A., "Kinetics of Asphaltene Precipitation in a Heptane-Toluene Mixture", Energy and Fuels; 24:1917-24, 2010
- [9] Eskin, D., Ratulowski, J., Akbarzadeh, K., Pan, S., "Modelling Asphaltene Deposition in Turbulent Pipeline Flows", Can J Chem Eng; 89:421-41, 2011.
- [10] Mohammadi, S., Rashidi, F., Ghazanfari, M. H., Mousavi-Dehghani, S. A., "Kinetics of Asphaltene Aggregation Phenomena in Live Oils", J Mol Liq; 222:359-69, 2016.
- [11] Schutte, K., A Hydrodynamic Perspective on the Formation of Asphaltene Deposits, Ph. D. Thesis, Delft University of Technology, 2016.
- [12] Anderson, T. B., Jackson, R., "Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds: Equations of Motion", Ind Eng Chem Fundam; 6:527-39, 1967.
- [13] Hoomans, B. P. B., Kuipers, J. A. M., Briels, W. J., Van Swaaij, W. P. M., "Discrete Particle Simulation of Bubble and Slug Formation in a Two-Dimensional Gas-Fluidised Bed: A Hard-Sphere Approach", Chem Eng Sci; 51:99-118, 1996.
- [14] Ergun, S., "Fluid Flow through Packed Columns", Chem Eng Prog; 48:89-94, 1952.
- [15] Wen, C. Y., Yu, Y. H., "Mechanics of Fluidization", Chem. Eng. Progress, Symp. Ser; 62:100-11, 1966.
- [16] Xu, B. H., Yu, A. B., "Numerical Simulation of the Gas-Solid Flow in a Fluidized Bed by Combining Discrete Particle Method with Computational Fluid Dynamics", Chem Eng Sci; 52:2785-809, 1997.
- [17] Cundall, P., Strack, O., "Discrete Numerical Model for Granular Assemblies" Int J Rock Mech Min Sci Geomech Abstr; 16:77, 1979.
- [18] Kruggel-Emden, H., Rickelt, S., Wirtz, S., Scherer, V., "A Study on the Validity of the Multi-Sphere Discrete Element Method", Powder Technol; 188:153-65, 2008.
- [19] Favier, J. F., Abbaspour-Fard, M. H., Kremmer, M. Raji, A. O., "Shape Representation of Axi-Symmetrical, Non-Spherical Particles in Discrete Element Simulation Using Multi-Element Model Particles", Engineering computations; 16:467-480, 1999.
- [20] Haji-Akbari, N., Masirisuk, P., Hoepfner, M. P., Fogler, H. S., "A Unified Model for Aggregation of Asphaltenes", Energy and Fuels; 27:2497-505, 2013.
- [21] Henry, C., Minier, J. P., Pozorski, J., Lefèvre, G., "A New Stochastic Approach for the Simulation of Agglomeration between Colloidal Particles", Langmuir; 29:13694-707, 2013.
- [22] Schutte, K. C. J., Portela, L. M., Twerda, A., Henkes, R. A. W. M., "Hydrodynamic Perspective on Asphaltene Agglomeration and Deposition" Energy & Fuels; 29:2754-2767, 2015.
- [23] Schutte, K. C. J., Portela, L. M., Henkes, R. A. W. M., "A Numerical Study on the Formation and Break-up of Particle Agglomerates", Chemical Engineering Science; 57:4737 - 4744, 2002.
- [24] Sirota, E.B., "Physical Structure of Asphaltenes", Energy & Fuels; 19:1290-1296, 2005.
- [25] Dabir, B., Nematy, M., Mehrabi, A.R., Rassamdana, H., Sahimi, M., "Asphalt flocculation and deposition. III. The molecular weight distribution", Fuel; 75:1633-1645, 1996.

- [26] Rahmani, N.H.G., Dabros, T., Masliyah, J.H., "Fractal structure of asphaltene aggregates", *J. Colloid Interface Sci*; 285:599–608, 2005.
- [27] Ferworn, K. A., Svrcek, W. Y., Mehrotra, A. K., "Measurement of Asphaltene Particle Size Distributions in Crude Oils Diluted with n-Heptane", *Ind Eng Chem Res*; 32:955–9, 1993.
- [28] Reinhold, A. and Briesen H., "Numerical Behavior of a Multiscale Aggregation Model—Coupling Population Balances and Discrete Element Models", *Chemical Engineering Science*; 70:165–75, 2012.
- [29] Gantt, J.A., Cameron, I.T., Litster, J.D. and Gatzke EP., "Determination of Coalescence Kernels for High-Shear Granulation Using DEM Simulations", *Powder Technology*; 170:53–63, 2006.
- [30] Flesch, J.C., Spicer, P.T. and Pratsinis SE., "Laminar and Turbulent Shear-Induced Flocculation of Fractal Aggregates", *AIChE Journal*; 45:1114–24, 1999.
- [31] Barthelmes, G., Pratsinis, S.E. and Buggisch H., "Particle Size Distributions and Viscosity of Suspensions Undergoing Shear-Induced Coagulation and Fragmentation", *Chemical Engineering Science*; 58:2893–902, 2003.