مروری بر دینامیک سیالات محاسباتی در مهندسی شیمی

رهبر رحیمی[1*]، محمود رضا رحیمی[1]

۱. زاهدان، دانشگاه سیستان و بلوچستان، گروه مهندسی شیمی

کدپستی ۹۸۱۶۴

rahimi@hamoon.usb.ac.ir

نهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران

دانشگاه علم و صنعت ایران
۳-۵ آذر ماه ۱۳۸۳

چکیده

دینامیک سیالات محاسباتی شاخه جدیدی از علم مکانیک سیالات است که در رشته های مختلف علوم و مهندسی مورد توجه قرار گرفته است. کاربردهای مختلف دینامیک سیالات محاسباتی در مهندسی شیمی و فرایند از جنبه های مختلف مورد نقد و بررسی قرار گرفته است، برای انجام محاسبات دینامیک سیالات محاسباتی به نرم افزارهایی نیاز است که می تواند شخصی یا تجاری باشند. انتخاب نرم افزار و سخت افزار مناسب برای انجام محاسبات دینامیک سیالات محاسباتی مستلزم داشتن اطلاعات کامل در این مورد است. در این مقاله به این موضوعات پرداخته شده است.

مزایای استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی در صنایع فرایندی شیمیایی ذکر شده اند و نمونه هایی از کاربرد موفقیت آمیز دینامیک سیالات محاسباتی ارائه شده اند، همچنین چشم انداز آینده کاربرد دینامیک سیالات محاسباتی در صنایع فرایندی شیمیایی و تحقیقات مورد نیاز برای گسترش CFD ارائه و اولویت بندی شده است .

کلمات کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی، طراحی تجهیزات فرایندی.

مقدمه

فرایندهای شیمیایی باید بطور مداوم با حداکثر سرعت و حداقل هزینه بهبود یابند . در این راستا بـه افـزایش مقیاس و توسعه فرایند، بهینه سازی، تغییر و یا بهبود عملیات فرایندی و سیستمهای کنترل نیاز مـی باشـد. معمولاً برای انجام این موارد به کارهای آزمایشگاهی زیادی نیاز می باشد، نیاز به کارهای آزمایشگاهی زیاد در تضاد با نیاز به تصمیم گیری سریع است. مدل سازی کلید اصلی حل این مسائل می باشد. چنانچه مدل هـای کامل[۱] برای تمام انواع عملیات واحدها در دسترس باشد، تعداد آزمایشات لازم برای افزایش مقیاس یـا ایجـاد تغییرات در یک واحد تولیدی را می توان بطور قابل ملاحظه ای کاهش داد [۱]. روشهای مـدرن بـرای مـدل سازی تجهیزات فرایندهای شیمیایی را می توان به دو شاخه تقسیم کرد. از یک طرف، مدل سـازی تجربـی و نیمه تجربی بر مبنای آنالیز ابعادی با تاریخچه طولانی را می توان یافت و از طـرف دیگـر دینامیـک سـیالات محاسباتی پیشرفته، که در بعضی از شاخه های علوم (مثل مهندسی هوافضا) کاملا شناخته شده است و روز به روز مهندسین شیمی به آن علاقه بیشتری نشان می دهند. هر دو شاخه اکنون در کنار هم وجود دارند. بـا توجه به اینکه مرتباً منابع محاسباتی ارزانتر و در دسترس تر می شوند، به زودی این دو بصورت یـک جریـان واحد "مدل سازی دقیق یا جزئی نگر" درمی آیند. اولین قدم در این زمینه توسط Bauer and Eigenberger [۲] در کاری که آنها آنرا "Multiscale approach" نامیدند برداشته شد . مدلهای CFD که می توان آنهـا را جـزء مدل های کامل به شمار آورد، دارای انعطاف پذیری زیادی هستند بطوریکه با تغییر میزان جزئی نگـری مـی توان خانواده ای از مدلها برا ی مراحل مختلف طراحی بدست آورد .

CFD چیست ؟

در مکانیک سیالات تحلیلی[۲](AFD) معادلات کلاسیک تنها برای حالات محدودی از جریانها(حدود ۸۰ مورد) بصورت تحلیلی قابل حل هستند[۳]. گرچه این حل ها در درک دینامیک سیالات بسیار مفیـد هـستند، ولـی بندرت برای تحلیل و طراحی مهندسی بکار می روند. از اینـرو مکانیـک سـیالات آزمایـشگاهی[۳](EFD) بـرای درک پدیده های مختلـف جریـان مـورد توجـه بـوده اسـت، لـیکن بـرای رسـیدن بـه ایـن اهـداف نیـاز بـه آزمایشگاههای مجهز می باشد و گاهی لازم است آزمایشات زیادی انجام شوند که نیاز به صرف وقت و هزینـه زیادی دارند. نتایج در قالب گروه های بدون بعد و روابط نیمه تجربی ارائه می شوند و معمـولاً بـرای اسـتفاده صنعتی از نتایج آزمایشات به افزایش مقیاس نیاز می باشد. اگر چه نظریات اصلی برای حـل عـددی معـادلات دیفرانسیل جزئی از بیش از یک قرن پیش ارائه شده اند، اما تـا قبـل از ورود کامپیوترهـای دیجیتـال عمـلاً استفاده اندکی از آنها شده بود. تحول عظیم در قدرت ذخیره سازی و پـردازش اطلاعـات توسـط کامپیوترهـا، باعث پیشرفت در روشهای عددی حل معادلات دینامیک سیالات گردیـد. ایـن امـر باعـث تولـد یـک شـاخه تخصصی به نام دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) گردید. CFD نیاز به فرضیات محدود کننـده کمـی دارد و تمام متغییرهای میدان جریان را بطورکامل توصیف می کند. روشهای مربوطه براحتی قابل استفاده هستند، و تعداد زیادی از فرایندهای مربوط به جریان سیال را می توان بطور همزمان مطالعه کرد بنابراین مسائل کـاملاً پیچیده را می توان با CFD بررسی کرد. می توان شبیه سازیهای CFD را پلی بین تئوری و واقعیت به حساب آورد. شبیه سازی با CFD دارای این مزیت بزرگ است که می توان اطلاعات ارزشمندی درباره رفتار جریان را

بدون انجام آزمایش بدست آورد، در این شبیه سازی ها این امکان فراهم می شود که بتوان عوامل مختلف موثر بر جریان را در مدل حذف و یا اضافه نمود و به این ترتیب سهم نسبی هر کدام از فرایند های جریان مشخص می شود در حالیکه فهم آنها از طریق آزمایشات، اگر غیر ممکن نباشد، بسیار سخت است. همچنین بدون اینکه یک مدل فیزیکی واقعاً ساخته شود، با روش های CFD می توان ایده های مختلف را در مورد آن امتحان کرد. این شبیه سازی ها امکان تحلیل دقیق در مراحل اولیه سیکل طراحی فرایند را با هزینه کم، ریسک کمتر و زمانی کوتاهتر از تست های آزمایشگاهی، امکان پذیر می نماید. تجهیزات را در حالت ظرفیت کامل می توان تحلیل کرد و بدین ترتیب می توان گفت که در این روش ها کار افزایش مقیاس هم انجام می شود. این روشها امکان رسیدگی کردن به نقش و عمل تجهیزات فرایندی را فراهم می سازند و اطلاعات با ارزش را به سازندگان تجهیزات، مدیران plant، مدیران تولید، مهندسین فرایند و واحد تحقیق و توسعه ارائه می نمایند. در حقیقت، این مزیت های CFD فقط وقتی قابل دسترسی هستند که معادلات بقاء اندازه حرکت، جرم و انرژی دقیقاً حل شوند و این کار برای اکثر کاربردهای مهندسی، بسیار مشکل می باشد. در جدول۱ به تعداد اندکی از کاربردهایی که CFD تا کنون در صنایع شیمیایی پیدا کرده اشاره شده است، ضمن آنکه هر روزه شاهد به کارگیری CFD در بخشهای دیگر نیز هستیم .

جدول۱- نقش CFD در تعدادی از تجهیزات فرایندی

تجهیزات فرایندی	نقش CFD
• اختلاط : راکتورهای تانک همزده، مخلوط کن های استاتیک، مخلوط کن های جت، واحد های امولوسیون ساز	بررسی بازده و کارآیی مخلوط کن های استاتیک بهینه سازی بازده تانک همزده پیش بینی توزیع تنش در راکتور تانک همزده افزایش مقیاس / کاهش مقیاس راکتورها
• وسایل انتقال سیال پمپ ها، کمپرسورها، شیرها، توزیع کننده های جریان، چند راهی ها، headers, manifolds	نقش محدوده بازدهی اطمینان از توزیع یکنواخت جریان حداقل کردن توان لازم تشخیص و حذف منابع ساییدگی در انتقال دوغاب ها (slurries)
• واحد های جداسازی سیکلون ها، شوینده ها، رسوب دهنده ها، سانتریفوژها و جداکننده های ثقلی	بهینه سازی و پیش بینی بازده بررسی طراحی و جزئیات ایجاد" نگاه به درون " فرایند
• تولید و انتقال حرارت مبدل های حرارتی، دیگ های بخار، کوره ها، گرمکن های فرایندی، مشعل ها	حداقل کردن توقف مبدل های حرارتی کنترل و تولید آلاینده ها حذف نقاط داغ(hot-spots) در گرمکن ها بهبود پایداری شعله و بازده مشعل ها بازیافت حرارتی بهتر
• راکتورها بستر ثابت، برج های حبابکار، بستر سیال، بسترهای چکیده	بهبود استفاده از کاتالیست به حداقل رساندن تلفات کاهش هزینه های عملیاتی توزیع مناسب سیالها در بستر
• فرایند های جانبی پر کردن، بسته بندی	حذف گرفتگی، سرریز کردن بهبود مصرف انرژی

زمان زیادی است که CFD به عنوان یک ابزار مهم در صنایع هوا فضا و خودروسازی شناخته شده است[۴]. و تا حد زیادی جای آزمایشهای وقت گیر و پرهزینه تونل باد را گرفته است. در مواردی در طی دهه گذشته با توسعه و کاربرد CFD، زمان طراحی تا تولید هواپیماها به نصف یا کمتر کاهش یافته است[۴]. مهندسین شیمی اخیراً متوجه توان بالقوه CFD برای توسعه و بهبود تجهیزات فرایندی شده اند، و این بیشتر به این دلیل است که در اطراف یک خودرو جریان تک فازی است، اما مدل سازی ها در مهندسی شیمی در اغلب موارد شامل جریانهای چند فازی و یا چند جزئی همراه با انتقال جرم و واکنش شیمیایی می باشند و مدل سازی و تحلیل عددی آنها نیازمند چالش های بیشتری است. کاربردهای چند فازی CFD فقط در طی دهه گذشته مورد توجه گسترده ای قرار گرفته است. با این وجود هنوز راه زیادی در پیش است تا CFD چند فازی به یک ابزار عمومی برای دست اندرکاران این شاخه تبدیل شود[۵]، گسترش این محاسبات به کامپیوترهای شخصی و رومیزی نخستین گام در این زمینه است .

مدل سازی محاسباتی جریان

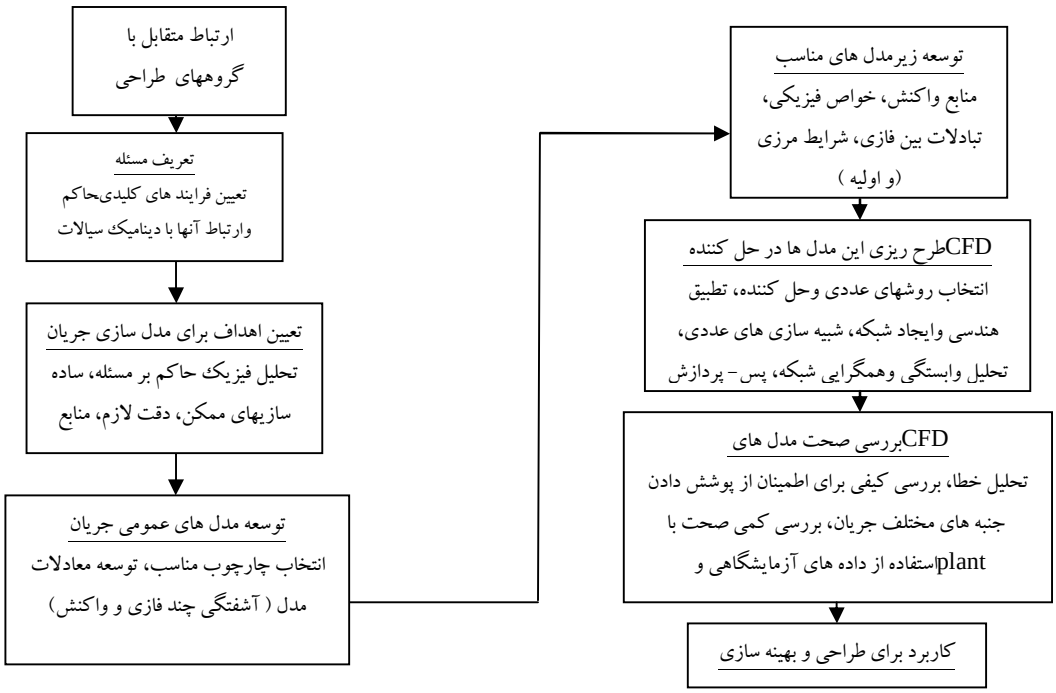
مدل سازی با CFD، برای کاربردهای مهندسی، نیاز به تجربه کافی در زمینه مربوطه و اطلاع کامل از جنبه های مختلف CFD، همراه با خلاقیت و قدرت نوآوری، دارد. فعالیتهای لازم در یک پروژه نمونه مدل سازی با CFD در شکل زیر آمده است. در ادامه به نمونه هایی از کاربردهای موفقیت آمیز CFD در صنایع شیمیایی اشاره شده است .

مهندسین خلاق حتی در فرایند ها و تجهیزاتی که از لحاظ تکنولوژی به حد کمال رسیده اند[۴] نیز تغییرات قابل توجهی ایجاد می کنند. یکی از مثالها در زمینه استفاده از دینامیکسیالات محاسباتی در بهبود بازده راکتور، اصلاح شیوه عملیاتی موسوم به Super–Condensed در راکتورهای بستر سیال پلیمریزاسیون(الفین ها) است. ظرفیت تولید محصول در این راکتورها توسط توان انتقال حرارت راکتور و شرایط عملیاتی کنترل می شود. در این شیوه عملیاتی، برای افزایش شدت انتقال حرارت، یک مایع فرار به درون بستر سیال شده تزریق می شود. افزایش واقعی در میزان جذب حرارت به تعدادی از پارامترها از جمله مکان و روش تزریق مایع، نحوه توزیع مایع تزریق شده، تماس بین مایع و ذرات جامد معلق و غیره، بستگی دارد. اطلاع دقیق از دینامیک سیالات چند فازی و اختلاط در این دستگاههای پیچیده منجر به انتخاب و طراحی درست نازل و مکان نازل ها شده است. تلاشهای اخیر بهینه سازی[۶] بر اساس آزمایشات دقیق و مدل سازی با دینامیک سیالات محاسباتی منجر به افزایش اساسی (از ۵۰ به ۱۰۰٪)در ظرفیت راکتورهای پلی الفین شد(یعنی تولید ۱۰۰۰۰۰-۵۰۰۰۰ تن در سال پلی اتلین بیشتر از راکتور موجود !). [۷] Brithing et al. گزارش کاملی از فعالیت های مدل سازی CFD در بزرگترین کمپانیهای صنایع شیمیایی آلمان(شامل Degussa – Huls, Axiva, Bayer and BASF) ارائه کرده و نشان داده اند که این روشها با موفقیت، برای کارهای مدل سازی در انواع دستگاهها و تجهیزات فرایندی - توزیع کننده گاز، اکسترودرها، همزنها، راکتورهای لوله ای، برجهای حبابکار،راکتورهای بستر ثابت، خشک کن های پاشنده و وسایل جداسازی - استفاده شده اند. قابل ذکر است که اکثر این مثالها حداقل دارای دو فاز می باشند.

مرور دیگری از وضعیت فعلی فعالیت های مدل سازی CFD توسط [۹] Sundareson ,LaRoche[۸] صورت گرفته است. تعداد زیادی از این چنین کاربردهایی ممکن است در صنایع امروزی به نتیجه رسیده باشند، اما بدلیل محرمانه بودن، بسیاری از این مثالها در مقالات آزاد آورده نمی شوند.

[۱۰]Cockx et al محاسبات CFD مربوط به برج ازناسیون آب آشامیدنی در مقیاس صنعتی را ارائه کرده اند. ایشان انتقال جرم ازن را در محاسبات در نظر گرفته اند و غلظت ازن در فاز مایع را محاسبه کرده اند. آنها با اضافه کردن بافلها و جابجا کردن ورودی برج به مکانهای مختلف توانستند به افزایش ۱۰۰درصدی در راندمان فرایند گندزدایی دسترسی پیدا کنند.

[۱۱]Erdal et al مدل سازی رفتار حباب در سیکلون های جداکننده گاز – مایع، با استفاده از نرم افزار CFX-4.1 را گزارش کرده اند. آنها توانسته اند درصد حباب که بطور ناخواسته از طریق مایع خروجی از پایین راکتور به بیرون راه می یابد را حساب کنند و تاثیر مدل سازی صحیح turbulent dissipation را بر این پدیده که اصطلاحاً "Carry-under" نامیده می شود نشان دهند.



شکل ۱- نمونه پروژه مدل سازی جریان

کاربرد هایی از روش های CFD چند فازی در مهندسی راکتورهای هسته ای، توسط[۱۲] Morii and Ogawa، ارائه شده است. کاربردهای CFD در نیرو گاههای معمول نیز گزارش شده است[۱۳]. در این نیروگاهها ذغال سنگ در یک فرایند با بستر چرخشی می سوزد و غبار توسط ته نشین کننده های الکترواستاتیک از جریان گاز خروجی جدا می شود. مدل سازی هیدرو دینامیک سینی غربالی با استفاده از

CFD هم اکنون در دانشگاه سیستان و بلوچستان به عنوان رساله دکتری در دست انجام مـی باشـد و چـشم انداز روشنی به چشم می خورد[۱۵،۱۴].

اهداف اجرایی

دینامیک سیالات محاسباتی می تواند مستقیماً به اهداف مورد نیاز صـنایع شـیمیایی کمـک کنـد. خـصوصاً کاربرد تکنیک های محاسباتی می تواند سبب بهبود موارد زیر شود[۱۶]:

- کوتاه شدن سیکلهای توسعه محصول – فرایند
- بهینه سازی وکنترل فرایندهای موجود برای بهبود بازده و مصرف انرژی
- طراحی کار آمد محصولات و فرایند های جدید
- بهبود در شرایط سلامتی[۵]، ایمنی و زیست محیطی

با در نظر گرفتن این اهداف کلی به عنوان مبنا، می توان اهداف اجرایی (کیفی و کمی) بـرای CFD مطـابق جدول ۲ مشخص کرد .

جدول ۲- اهداف اجرایی

اهداف کیفی	اهداف کمی
افزایش اطمینان در طراحی (کاهش ریسک)	کم کردن زمان به نتیجـه رسـیدن (از تحقیـق تـا طراحـی نهایی) به ۵-۳ سال
کاهش / حذف خطاهای طراحی	کاهش انرژی جـدا سـازی و بهبـود رانـدمان جـدا سـازی- حداقل به اندازه ۲۰ درصد
افزایش نوآوری و خلاقیت	کاهش زمان plant down time به یک درصد
کاهش مصرف سوخت در واحد محصول	
بهبود انتقال حرارت (بازیافت هدررفت حرارت)	
بهینه سازی فرایندها به منظور افزایش بازده و کمک به گسترش فرایند	
ایجاد بانک مخصوص ابزارهای محاسـباتی بـرای جریانهـای تـک فازی و چند فازی	

با استفاده از روشهای توسعه (بـدونCFD) زمان به نتیجه رسیدن فرایند بین ۷ تـا ۱۰ سـال مـی باشـد[۱۶]، نتیجه اولیه کاربرد CFD کاهش زمان به نتیجه رسیدن توسعه فرایند(طراحی plant) و توسعه یک محـصول جدید می باشد. در فازهای نخست توسعه فراینـد و محـصول (یعنـی بهینـه سـازی آزمایـشگاهی و افـزایش مقیاس)، CFD دارای تاثیر بیشتری است. CFD با افزایش اطمینان در طراحی، کاهش یـا حـذف خطاهـای طراحی، ایجاد امکانات مشاهده نتایج طراحی فرایند، بکار بردن نوآوریها و ابداعات باعث سـهولت در طراحـی می شود .

کاربرد CFD در بهینه سازی فرایند های با مصرف زیاد انرژی(مثل جدا سازی ها) می تواند راندمان جداسازی را بهبود بخشد، انرژی مصرفی را کاهش دهد و بازده زیست محیطی را بالا ببرد. همچنین CFD می تواند راهی برای بهبود انتقال حرارت مهیا سازد(مثل بازیابی هدر رفت انرژی) و نیازهای کلی انتقال حرارت در Chemical plant را به نحو چشم گیری بهبود بخشد .

نرم افزارهای دینامیک سیالات محاسباتی

اولین برنامه های CFD در حدود سالهای ۱۹۶۰ توسعه داده شد، اما بدلیل محدودیت های محاسبات توسط کامپیوترها، تا سالهای ۱۹۸۰ کدهای تجاری ارائه نشدند. در سال ۱۹۷۴ برنامه TEACH توسط Imperial college در دسترس عموم قرار گرفت و باعث توجه گسترده ای به روش حجم محدود گردید، این برنامه زیر ساخت اصلی تمامی نرم افزارهای تجاری امروزی است[۱۷] .

رشد پیوسته و فوق العاده سریع قدرت پردازش کامپیوترها، استفاده از مدلهای فیزیکی بهتر در بسیاری از این نرم افزارها، وUser interfaces بهتر استفاده از این نرم افزارها را برای افراد مبتدی امکانپذیر کرده است، امروزه نرم افزارهای CFD حتی روی کامپیوترهای شخصی هم قابل اجرا هستند. ایجاد یک بانک ابزارهای محاسباتی، که برای محققین کم تجربه براحتی قابل استفاده باشد، یک هدف عالی است. این ابزارها را می توان با کدهای "Plug –and – Play" طراحی نمود تا بکارگیری آسان زیر مدل ها و الگوریتم های حل جدید روی ماشین های محاسباتی مختلف - مثل ماشینهای رومیزی با بازده بالا، ماشینهای پردازش برداری سریع و بزرگ و پردازشگرهای موازی – را ممکن سازد. کدهای پیشنهادی باید مستقل از معماری کامپیوترها باشد، تا در صورت تغییر در این معماریها به تغییرات درکدها نیاز نباشد. یک بانک CFD با مشخصات بالا بطور گسترده ای مورد قبول و استفاده جامعه مهندسین شیمی و فرایند قرار خواهد گرفت. تعداد زیادی از کدهای تجاری، شخصی[۶] و رایگان ارائه شده اند که دارای قابلیتها، مدلهای فیزیکی، روشهای عددی، انعطاف پذیری هندسی و User interfaces متفاوتی هستند. این کدها معمولاً از سه قسمت تشکیل شده اند: پیش پردازشگر[۷]، حل کننده[۸] و پس پردازشگر[۹]، همچنین برنامه هایی فقط برای پیش پردازش و یا پس پردازش ارائه شده اند. مشخصات لازم برای هر کدام از قسمتهای یک نرم افزار CFD ارائه شده است[۱۸]، از این اطلاعات می توان برای بررسی نرم افزارها و انتخاب نرم افزار مناسب استفاده کرد. در جدول۳ اسامی تعدادی از این نرم افزارها آمده است. بررسی و جمع بندی کلی از این نرم افزارها در سایت های زیر یافت می شوند: http://www.icemcfd.com/cfd/CFD_Codes.html و http://www.cfd-online.com افزایش استفاده از CFDدر صنایع فرایندی شیمیایی(CPI) باعث ایجاد یک سایت تخصصی به نام http://www.cpicfd.org. توسط CPI CFD User Group گردیده است. با وجود پیشرفت هایی که در زمینه نرم افزارها و مدلهای فیزیکی و سایر مسائل مرتبط با CFD صورت پذیرفته است، هنوز هم CFD برای تبدیل شدن به یک ابزار همگانی (علی الخصوص برای گرفتن جوابهای دقیق و سریع در تصمیم گیریهای فوری و اضطراری) راه زیادی در پیش دارد. البته با قاطعیت می توان اذعان داشت که اکثر این محدودیت ها مربوط به سخت افزار کامپیوترها می باشند، به این معنی که با وجود پیشرفت های صورت گرفته در زمینه سخت افزار کامپیوترها، هنوز هم کامپیوترها دارای سرعت پردازش کافی برای محاسبات CFD (علی الخصوص جریانهای چند فازی و چند جزئی) نیستند. با مراجعه به زمان CPU در شبیه سازی های انجام شده با CFD این ادعا به اثبات می

رسد، در جدول۴ نمونه ای از آن آورده شده است[۵]. البتهCFD در انتظار تحول های اساسی در قدرت پردازش کامپیوترها نخواهد ماند و به پیشرفت خود ادامه می دهد، انتظار می رود هر تحول اساسی در قدرت پردازش کامپیوترها حوزه های جدیدی را به روی CFD بگشاید. در مورد انتخاب نرم افزار باید بیشترین دقت را بکار برد بطور کلی در ابتدا باید تواناییهای نرم افزارها را مرور کرد و سپس نسبت به مقایسه و انتخاب نرم افزار اقدام کرد. علی الخصوص در مورد مسائل چند فازی و چند جزئی باید از تواناییهای نرم افزار در این مورد مطمئن شد. برای مثال گر چه نرم افزارFluent در مسائل تک فازی کاملاً مطرح می باشد ولی در مسائل چند فازی و چند جزئی دارای ضعف شدیدی است و مسائل پیچیده را نمی توان به خوبی با این نرم افزار حل کرد. نرم افزار CFX در این زمینه کاملاً شناخته شده است و توان بسیار عالی در تحلیل مسائل چند فازی و چند جزئی دارد، علی الخصوص نسخه 5.5 به بعد(اولین نسخه این نرم افزار Flow3D نام داشت). انتخاب مشخصات سخت افزاریکامپیوترهای مورد استفاده باید بعد از انتخاب نرم افزار صورت بگیرد چون در بسیاری از موارد نرم افزارها نیاز به مشخصات سخت افزاری خاصی دارند. همه نرم افزارهای تجاری حداقل مشخصات مورد نیاز را پیشنهاد می دهند .

جدول۳- بعضی از معروفترین نرم افزارهای CFD

Vendor	Products
General Purpose CFD Codes	
FLUENT	Pre-processors: preBFC,GAMBIT, Tgrid Main codes: Fluent4.5, Fluent5, Fluent6, FIDAP, Rampant, Nekton,MixSim Post-processors: in-built in above codes, Flpost www.fluent.com
AEA Technology	Pre-processors: CFX-Build Main codes: CFX4, CFX5, CFX-ProMixus, CFX-TASCFLOW Post-processors: CFX-Visualize www.aeat.com/cfx
CHAM	Main codes: PHOENICS Post-processors: PHOTON www.cham.co.uk
STAR-CD	Pre- and post processors: PROSTAR Main codes: STAR-CD www.cd.co.uk
AVL	Pre-processors: FAME Main codes: FIRE, SWIFT Post-processors: in-built in above codes www.avl.com
CFDRC	Pre-processors: CFD-GEOM Main codes: CFD-ACE6, CFD-ACE(U) Post-processors: CFD-VIEW www.cfdrc.com
Stand-alone Pre-processore	
Pointwise	Gridgen www.pointwise.com
ICEM-CFD	ICEM-CFD Tetra, ICEM-CFD Hexa www.icemcfd.com
Stand-alone Post-processore	
AVS	AVS/AVS Express www.avs.com
CEI	Ensight, EnsightGold www.ceintl.com
Field View	

جدول ۴- خلاصه شبیه سازی های هیدرودینامیک سینی غربالی

Authors	مدل	معادلات فیزیکی			سایر مشخصات	CPU time
		ضرایب دراگ	آشفتگی			
			فاز مایع	فاز گاز		
Mehta et al	Steady state یک بعدی – فقط برای فاز مایع	ترم های اضافی در معادله حرکت مایع با روابط تجربی	روابط تجربی	-	برای رژیم froth	داده نشده است
Fischer & Quarini	گذرا- سه بعدی- هیدرودینامیک گاز و مایع	مقدار ثابت ۰/۴۴ ×	روابط تجربی	-		داده نشده است
Liu et al	دو بعدی- مدلسازی هیدرودینامیک مایع	ترم های اضافی در معادله حرکت مایع	k-ε با ترم هایی برای تاثیر گاز بر حرکت مایع	-		داده نشده است
Krishna et al	گذرا- سه بعدی- دو فازی هیدرودینامیک هر دو فاز	از روابط تجربی	k-ε استاندارد	-	ناودان در نظر گرفته نشده است. قطر سینی ۰/۳ متر	۴ روز
Gesit et al	گذرا- دو فازی- سه بعدی هیدرودینامیک هر دو فاز	از روابط تجربی	k-ε استاندارد	-	ناودان در نظر گرفته شده است. قطر سینی ۱/۲۲ متر	۱۲ ساعت تا یک هفته
Rahimi et al	گذرا- سه بعدی- دو فازی هیدرودینامیک هر دو فاز انتقال جرم روی سینی پیش بینی راندمان	از روابط تجربی	k-ε استاندارد	-	ناودان در نظر گرفته شده است. برای سینی های با قطرهای مختلف	۸ ساعت تا یک هفته

× این ضریب برای رژیم froth و spray قابل استفاده نیست

تجربه نویسندگان در مورد انتخاب نرم افزار و سخت افزار برای "شبیه سازی هیدرودینامیک سینی‌غربالی" حاکی از آن است که چهار مورد کلیدی از مشخصات سخت افزاری(CPU، کارت گرافیک، حافظه دیسک سخت و RAM) باید مورد توجه بسیار قرار گیرند، گر چه ممکن است انتخاب سیستم های بالاتر نیاز به سرمایه گذاری بیشتری داشته باشد لیکن در عمل با کم شدن زمان محاسبات جبران می شود. همچنین بطور کلی استفاده از پردازش موازی و بکارگیری PC با مشخصات مناسب بهتر از استفاده از سوپرکامپیوترهاست، علی الخصوص در کشور ما که مشکلاتی در تهیه سوپر کامپیوترها وجود دارد. تحریمهایی که برای کشور ما وجود دارد، بر کیفیت نرم افزارهای موجود در کشور تاثیر منفی گذاشته است. زیرا اولاً نرم افزارها مستقیماً از شرکت ارائه کننده تامین نمی شود و ثانیاً شرکت های ارائه کننده داخلی اکثراً قفل های سخت افزاری بر روی نرم افزار نصب می کنند که با بعضی از قسمت های نرم افزار سازگاری نداشته و باعث اختلال در بعضی از ماژولهای نرم افزار می شود. نکته دیگر آنکه بعضی نرم افزارها(مثلاً fluent) که بطور گسترده ای در کشور پخش شده است تمامی قابلیت های نرم افزار اصلی را ندارد و در ضمن در حین اجرای ماژولها مشکلاتی بوجود می آید که در بعضی موارد باعث سردرگمی کاربر می شود. با

وجود این مشکلات در اکثر دانشگاهها تحقیقات بسیار خوبی در رشته های مختلف مهندسی و علـوم صـورت می گیرد.

بررسی صحت نتایج و درستی مدل

در قسمت های قبل راجع به مباحث مختلفی از CFD بحث شد، در این قسمت به نکات مختصری راجـع بـه بررسی درستی مدل و صحت و دقت نتایج اشاره می شود. خاطر نشان می شود که شبیه سازی هـای عـددی معمولاً دارای تقریب هستند. دلایل مختلفی باعث می شود که بین نتایج محاسبات و مقـادیر واقعـی تفـاوت وجود داشته باشد. این خطاها ممکن است از هر بخشی از تحلیل، که برای انجام شبیه سازی عددی بکار رود، حاصل شود از جمله:

- معادلات حرکت سیال؛
- داده های ورودی و شرایط مرزی؛
- روشهای عددی و همگرایی؛
- محدودیتهای(قید و بندهای) محاسباتی؛
- تفسیر نتایج، و غیره.

تحقیقات پراکنده ای در مورد دقت و خطا در محاسبات CFD انجام شده است[۱۹و۲۰]. بنابراین لازم اسـت که استراتژی مناسبی برای اسـتفاده از پتانسیل و تـوان ابزارهـای CFD بـرای تحلیـل هـا و طراحـی هـای مهندسی،علی رغم محدودیتهایش، تدارک دیده شود. حتی قبل از بررسی درستی مدل، لازم اسـت کـه یـک آنالیز خطای سیستماتیک، در مورد شبیه سازی کامپیوتری انجام شـده، بکـار گرفتـه شـود. تـاثیر روشـهای عددی در نتایج پیش بینی شده و همچنین مجموع خطاها(قسمت های مختلف شبیه سـازی) بایـد بررسـی شوند تا مطمئن شویم که در محدوده قابل قبول قرار دارند. برای مثال در بعضی موارد در مرحله طرح ریـزی مدل ها برای حل(شکل۱) لازم است پاره ای از معیارها را چک نمود یک نمونـه از آن مـی توانـد حـساسیت مسئله به اندازه شبکه مورد استفاده باشد، که به این ترتیب اندازه بهینه شـبکه بنـدی معـین مـی شـود. در شبیه سازی هیدرودینامیک سینی غربالی با استفاده از CFD این مورد انجام شد و با مقایسه نتیجـه بدسـت آمده برای ارتفاع مایع زلال روی سینی با مقادیر تجربی مشاهده گردید که این بررسی می تواند تـاثیر قابـل توجهی در دقت حل مسئله داشته باشد. نتایج شبیه سازی شده باید بـا اسـتفاده از ابزارهـای پـس پـردازش بررسی و امتحان شوند. بررسی نتایج به این منظورانجام می شود که ثابت شود مدل جنبه های کیفـی مهـم جریان(مثلاً لایه های برش[۱۰] و یا گرداب های پشت جسم[۱۱]) را تحت پوشش قرار داده است. اگر مـدل هـای phenomenological استفاده شده باشند، بررسی کمی نتایج شبیه سازی شده ضروری است. حتی اگر هدف از مدل سازی جریان بررسی و غربال کردن کیفی ترکیب های ممکن از انتخابهای قابل استفاده باشد، باز هم بررسی کمی شبیه سازی ها، ضروری است تا اطمینان حاصل شود که پدیده های اصلی کنترل کننده بطـور کامل پوشش داده شده اند، در بسیاری از حالات، داده های مربوط به میدانهای جریان در تجهیزات صـنعتی در دسترس نمی باشد و یا اندازه گیری آن مشکل می باشد. در این حالات باید بررسی صحت و درستی شبیه سازی ها بطور غیر مستقیم انجام شود. برای مثال در یک راکتور درستی نتـایج را مـی تـوان در مقایسه بـا توزیع زمـان اقامـت یـا زمـان اخـتلاط و غیـره بررسـی نمـود. گـاهی نیـز لازم اسـت کـه زیـر مـدل هـا و

phenomenology مختلف موجود در مدل کلی جریان را بطور جدا گانه مورد بررسی قرار داد. مجدداً بر این موضوع تاکید می شود که فرایند های کلیدی کنترل کننده جریان باید بطور کامل شبیه سازی شوند.

تحقیقات مورد نیاز برای گسترش CFD

بطور کلی شبیه سازی با CFD شامل سه مرحله است تعریف مسئله، حل برای میدان جریان و مشاهده و تحلیل نتایج. در مرحله اول مشخصات هندسی سیستم مورد نظر (هندسه جریان)، مدل های فیزیکی مورد استفاده، خواص فیزیکی، شرایط اولیه و مرزی و شبکه بندی، برای حل توسط نرم افزار، ایجاد و یا تعریف می شوند در مرحله دوم معادلات ریاضی مشخص شده برای میدان جریان تعریف شده در مرحله اول، توسط نرم افزار حل می شود و در قسمت سوم عملیات آماده سازی و مشاهده نتایج مطابق با خواست کاربر انجام می شود. کلیدی ترین مسئله در هر شبیه سازی چگونگی فرضیات اعمال شده برای کاهش معادلات دیفرانسیل جریان و مدل های فیزیکی استفاده شده در شبیه سازی می باشد. مدل های فیزیکی در واقع معادلات تکمیلی برای تعریف پدیده های فیزیکی مرتبط با جریان مثل آشفتگی فازها، انتقال جرم، مومنتوم و حرارت درون و بین فازها، واکنش های شیمیایی، میدان های نیروهای موثر و غیره می باشد. همانطور که در بحث شبیه سازی هیدرودینامیک سینی غربالی مشاهده می شود موفقیت هر شبیه سازی وابسته به فرضیات ساده کننده و مدل های فیزیکی مورد استفاده است[۱۵]. توسعه مدل های فیزیکی مناسب یکی از فازهای تحقیق و توسعه برای استفاده های آتی CFD می باشد، سایر موارد مورد نیاز برای توسعه CFD در جدول ۵ ذکر شده اند. مهمترین مسئله ای که در حال حاضر از گسترش CFD و تبدیل آن به یک ابزار عمومی برای تصمیم گیری های سریع ممانعت ایجاد کرده است سرعت پردازش کامپیوترهاست. این سرعت ها برای محاسبات چند فازی (و یا چند جزئی) بسیار کم هستند. البته CFD مسیر پیشرفت خود را علی رغم این محدودیت ادامه خواهد داد، با این وجود پیشرفت در زمینه سرعت پردازش کامپیوترها سبب سهولت استفاده از CFD و در نتیجه فراگیر شدن آن می شود.

نتیجه گیری

استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی در مهندسی شیمی مورد بحث و بررسی قرار گرفت. مزایای شبیه سازی و مدل سازی با دینامیک سیالات محاسباتی در زمینه های مختلف از جمله در طراحی فرایند، نقش و عملکرد تجهیزات فرایندی و غیره ارائه شد. بعضی از کاربردهای اخیر دینامیک سیالات محاسباتی در صنایع فرایندی شیمیایی ارائه و اهداف اجرایی برای استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی در نیازهای صنایع شیمیایی ارائه شدند. همچنین نرم افزار و سخت افزارهای لازم برای انجام محاسبات دینامیک سیالات محاسباتی ارائه و نقد و بررسی شدند و در این خصوص پیشنهادهایی ارائه گردید. مراحل و اطلاعات لازم برای مدل سازی جریان ذکر شدند و صحت و درستی نتایج محاسبات مورد تحلیل قرار گرفت.

در مجموع نشان داده شد که دینامیک سیالات محاسباتی ابزار فوق العاده قدرتمندی برای استفاده در زمینه های کاری مهندسی شیمی می باشد. با این وجود لازم است، که در مراحل مختلف مدل سازی محاسباتی جریان، فرضیات و روشها و مدلهای مورد استفاده را به دقت کنترل کرد. آنالیز خطا در هر مرحله به انتخاب بهینه روشها و مدلها منجر خواهد شد.

جدول۵- تحقیقات مورد نیاز CFD

روشهای عددی	روابط اساسی وپدیده ها	سنجش آزمایشگاهی نتایج
تشخیص و مدلسازی فازهای رقیق و غلیظ ▶	تشخیص و مدلسازی رژیمهای رقیق و غلیظ ▶	طرح و توسعه بسترهای آزمایش جریانهای چند فازی ▶
توسعه بانک اطلاعات برای طبقه بندی و تصدیق کدها ▶	تشخیص و مدلسازی بر هم کنش بین فازها ▶	انجام سنجشهای آزمایشگاهی در مقیاس کوچک ▶
پذیرش سیستمهای دارای هندسه پیچیده جریان●	توسعه روابط تکمیلی قابل اطمینان برای آشفتگی در جریانهای چند فازی ▶	انجام سنجشهای آزمایشهای اثرات مربوط به پدیده های مقیاس کوچک و بزرگ بصورت جداگانه ▶
بهبود روشهای موازی سازی محاسبات●	تشخیص شرایط مرزی و برهم کنشها (مثل ورودی و دیواره و برهم کنشها با سطوح داخلی) ▶	توسعه روشهای تشخیص و حسگرهای جدید برای اندازه گیریهای آزمایشگاهی جریانهای چند فازی ▶
طرح ماژولهایی برای سفارشی سازی پیچیدگی مسائل برای نیازهای مختلف کاربر●	توسعه مدلهای شیمیایی برای پدیده های سطحی و حجمی ●	بهبود توانایی آنالیز نتایج●
توسعه الگوریتمها و حل کننده های با دقت بالا و درستی بیشتر●	تشخیص و مدلسازی سیستم های با توزیع اندازه گسترده○	توسعه روشهای آزمایشگاهی جدید قابل استفاده در جریانهای با مقیاس بزرگ●
تشخیص و مدلسازی پدیده های شیمیایی در مسائل چند فازی○	پذیرش موازنه جمعیت○	
توسعه الگوریتم هایی برای مسائل دارای مرز متحرک (مثل ذوب پلیمرها) ○	پذیرش و مدلسازی انتقال حرارت چند فازی○	
اولویت ها: ▶خیلی زیاد	● زیاد	○ متوسط

منابع و مراجع

1.Marquardt, W., proceeding of PSE'94, pp:1-24, (1994).

2. Bauer, M., Eigenberger G., Chem. Eng. Sci., 56(2001), pp1067-1074.

3. Stern, F., @website: www.icaen.Uiowa. edu\~ fluids

4. Griebel, M., Vieweg-Verlag, Braunschweig, Wiesbaden (1995).

۵. محمودرضا رحیمی و همکاران، مجله مهندسی و علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، پذیرش برای چاپ.

6. Sinclair, K. B., IXth International conference, Texas USA, (1995).

7. Birthig,A.et al.CFD in der chemischen verfahrenstechnik aus industrieller sicht,Chemie Ingenieur Technik 72 (3), pp:175-193, (2000).

8.LaRoche, R.D.; Proceeding Chemputers Europe 4, Barcelona/Spain (February 1998).

9. Sundaresan, S.; AIChE Journal 46 (6), pp:1102-1105, (2000).

10. Cockx, A. et al., Chem. Eng. Sci, 54(1999), pp5085-5090.

11. Erdal, F. M. et al., Society of petroleum Engineers Production and Facilities, 15(2000)4, 217-222.

12. Morii, T., Ogawa, Y., Nuclear Technology 115(1996), 333-341.

13. Gidaspow, D., et al., Multiphase Navier-Stokes equation solver, appeared in: Celik, I. et al., (Editors); Numeri cal methods for multiphase flows. ASME. NewYork(1990).

۱۴. محمود رضا رحیمی، رساله دکتری مهندسی شیمی، شروع بهمن۸۱.

15. Rahimi, R., Rahimi. M. R., Nandakumar, k. and Shahraki, F., paper accepted in 54th Canadian Confrence of Chemical Engineering, Canada (2-60ct. 2004).

16. Technology Roadmap for Computational fluid dynamics, the U.S. chemical industry, Jan. 1999.

17. Growe, C. T., Multiphase flows with droplets and particles 1998, CRC press.

18. Ranade, V.V., Computational flow modeling for chemical reactor engineering, 2002 Academic press.

19. Turkel, E., Annu. Rev. Fluid. Mech. 1999, 31, 385-416.

20. Roache, P. J., Annu Rev. Fluid. Mech. 1997, 29, 123-160.