

CFD ابزاری جدید برای آموزش و پژوهش در مهندسی شیمی

بهرام دبیر، فرامرز هرمزی، سید مهدی علایی

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

چکیده: دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) ابزاری قدرتمند برای بررسی دقیق میدان جریان، درجه حرارت، غلظت و... است. این روش مجموعه‌ای از فنون حل عددی معادلات حاکم بر پدیده‌های انتقال ممتوم، حرارت و جرم درون سیالات است که با توسعه سیستم‌های سخت‌افزار و نرم‌افزار رایانه‌ها، قابلیت‌های فراوانی در آن ایجاد شده است. CFD با این قابلیت‌ها به یکی از روش‌های اصلی تحقیق و پژوهش در رشته‌های مختلف مهندسی تبدیل شده است. اخیراً استفاده از این روش در مهندسی شیمی نیز مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله با نشان دادن قابلیت‌ها و مشکلات استفاده از CFD، پیشنهادهایی برای چگونگی آشنا کردن دانشجویان با CFD ارائه شده است.

واژه‌های کلیدی: مهندسی شیمی، آموزش و پژوهش، دینامیک سیالات محاسباتی

۱. مقدمه

پدیده‌های انتقال یکی از مهم‌ترین مفاهیم نظری است که به دانشجویان دوره‌های کارشناسی و کارشناسی ارشد مهندسی شیمی آموزش داده می‌شود. در اغلب موارد، فرمولبندی پایه پدیده‌های انتقال به شکل معادلات دیفرانسیل پاره‌ای در می‌آید. بیشتر این معادلات به صورت معادلات دیفرانسیل پاره‌ای مرتبه دوم ظاهر می‌شوند که در دروس مکانیک سیالات، انتقال حرارت، انتقال جرم و... اهمیت ویژه‌ای دارند.

معادلات حاکم در این دروس، یک مجموعه معادلات دیفرانسیل پاره‌ای غیر خطی و وابسته می‌باشند که باید در یک قلمرو ناهموار با شرایط اولیه و مرزی مختلف حل شوند. در بیشتر موارد، حل تحلیلی معادلات انتقال بسیار محدود است. با اعمال شرایط مرزی این محدودیت‌ها بیشتر می‌شوند. به عنوان مثال، یک معادله دیفرانسیل پاره‌ای با شرایط مرزی دیریشله (یعنی شرطی که در آن مقادیر متغیر وابسته در مرزها داده شده‌اند) ممکن است دارای حل تحلیلی باشد در حالی که همان معادله دیفرانسیل با شرایط مرزی نیومن (که در آن گرادیان عمودی متغیر وابسته در مرزها داده می‌شود) ممکن است حل تحلیلی نداشته باشد.

برای حل این مشکل، محققان پیشین از روش‌های تجربی برای به دست آوردن اطلاعات مورد نیاز استفاده می‌کردند و با پردازش این اطلاعات، نمودارها با معادلات تجربی ارائه می‌کردند. گرچه امروزه این مطالب حجم بسیاری از کتاب‌های آموزشی مهندسی شیمی را تشکیل داده است و از آنها برای طراحی اکثر تجهیزات صنایع شیمیایی استفاده می‌شود، این روش به عنوان یک روش آموزشی، پژوهشی و کاربردی دارای چندین محدودیت است که در جدول ۱ بیان شده است.

روش دیگر، استفاده از روش‌های عددی برای حل معادلات انتقال حاکم بر سیستم‌های واقعی است، البته تحلیل‌های عددی برای سالیان دراز مطرح بوده است، اما پیشرفت‌های به دست آمده در ساخت کامپیوترهای با سرعت و پر حافظه، امکان حل معادلات پدیده‌های انتقال را با استفاده از روش‌های عددی مختلفی فراهم کرده است این پیشرفت‌ها سبب معرفی روش‌های عددی جدیدتری شده‌اند که تقریباً به صورت روزانه پیشنهاد می‌شود. مجموعه روش‌های عددی حل معادلات حرکت و انرژی درون سیالات، علمی مستقل به نام دینامیک سیالات محاسباتی^۱

یا به اختصار CFD را تشکیل می‌دهد.

جدول ۱. مقایسه روش‌های مختلف بررسی مسائل در مهندسی شیمی

روش عددی CFD	روش تجربی	روش تحلیلی
مزایا		
<ul style="list-style-type: none"> ● کاربرد ساده ● حداقل فرضیات ساده‌کننده ● قابلیت بهینه‌سازی ● تعیین جزئیات میدان سرعت، حرارت و غلظت ● توانایی حل مسائل پیچیده ● عدم محدودیت به شرایط عملیاتی ● هزینه پایین 	<ul style="list-style-type: none"> ● مشاهده رویدادها ● جمع‌آوری اطلاعات از یک سیستم واقعی 	<ul style="list-style-type: none"> ● عدم نیاز به ابزار ● حداقل نیاز به محاسبات کامپیوتری
معایب		
<ul style="list-style-type: none"> ● کم بودن حافظه و سرعت را یانه‌ها برای مسائل بزرگ ● کامل نبودن مدل‌های محاسباتی برای جریان‌های پیچیده 	<ul style="list-style-type: none"> ● ارائه اطلاعات کلی و اندک از رویدادهای واقعی موجود در سیستم ● درک ناقص دانشجویان و مهندسان از پدیده‌های انتقال موجود در سیستم ● متفاوت و گاه متناقض بودن اطلاعات تجربی ● فقدان یا عدم امکان استفاده از روابط تجربی برای برخی مسائل ● زمان بری، هزینه بری و گاه عملی نبودن این روش به عنوان یک روش پژوهشی ● کاهش دقت در بزرگ کردن مقیاس 	<ul style="list-style-type: none"> ● نیاز به فرضیات ساده‌کننده فراوان ● نیاز به شکل هندسی ساده عدم کارایی در مسائل عملی

CFD ابزاری قدرتمند برای بررسی دقیق میدان سرعت، درجه حرارت، غلظت و ... بوده است

و یکی از روش‌های اصلی آموزش، پژوهش و طراحی در سایر رشته‌های مهندسی می‌باشد. اخیراً استفاده از این روش در مهندسی شیمی نیز مورد توجه قرار گرفته است [۷ و ۱۰]. در این مقاله ابتدا مزایای به کارگیری CFD به عنوان ابزاری جدید برای آموزش، پژوهش و طراحی در مهندسی شیمی بیان شده است و در ادامه آن کدهای CFD قابل استفاده در مهندسی شیمی معرفی می‌شود، سپس چند مثال از تجربه‌های نویسندگان این مقاله در استفاده از CFD بیان می‌شود. در انتها پیشنهادی برای چگونگی آشنا کردن دانشجویان مهندسی شیمی با CFD ارائه می‌گردد.

۲. CFD در مهندسی شیمی

همانگونه که بیان شد، تمایل به استفاده از CFD در مهندسی شیمی در حال افزایش است، زیرا این روش نسبت به سایر روش‌های بررسی (روش تحلیلی و روش تجربی) دارای مزایای بیشتر و معایب کمتری است (جدول ۱).

به کارگیری CFD نسبتاً آسان و کم هزینه است و برای حل مسائل به فرضیات ساده کننده چندانی نیاز ندارد. با استفاده از CFD جزئیات میدان جریان سیال، نحوه تغییرات درجه حرارت و غلظت و ... به دست می‌آید. با حل یک مسئله می‌توان اثر پارامترهای مختلف را بررسی و سیستم مورد بررسی را بهینه کرد. بدین ترتیب، مشاهده می‌شود که با به کارگیری CFD برای حل مسائل مهندسی شیمی، اطلاعات فراوانی به دست می‌آید. این اطلاعات می‌تواند از نظر آموزشی برای افزایش درک دانشجویان مهندسی شیمی از رویدادهای واقعی موجود در سیستم‌ها مورد استفاده قرار گیرد. یا به عنوان وسیله‌ای قدرتمند به پژوهشگران این رشته در بررسی مسائل مختلف یاری رساند یا به عنوان ابزاری برای طراحی تجهیزات فرایندی در اختیار مهندسان شیمی قرار گیرد.

۳. کدهای CFD قابل استفاده در مهندسی شیمی

چند کد CFD با عنوان‌های FLUENT, PHOENICS, FLOW3D, ASTEC, FIDAP و CFX در مهندسی شیمی قابل استفاده است. هر یک از این کدها دارای قابلیت‌ها و توانایی‌های ویژه‌ای هستند. انتخاب هر یک از این کدها با توجه به توانایی آنها در حل مسائل مورد بررسی انجام می‌گیرد. جدول ۲ مقایسه‌ای بین ویژگی‌های این کدها ارائه شده است. اکثر کدهای CFD موجود از روش‌های تفاضل محدود، حجم محدود و المان محدود برای حل

معادلات استفاده می‌کنند. سایر روش‌های عددی مانند روش المان‌های مرزی هنوز کاربرد گسترده‌ای ندارند. برای جریان آشفته، از مدل‌های ساده ویسکوزیته چرخانه‌ای (eddy) تا مدل‌های پیچیده تنش‌های رینولدز می‌توان استفاده کرد.

جدول ۲. مقایسه قابلیت‌های چند کد CFD

	PHOENICS	FLUENT	FLOW3D	ASTECC	FIDAP	CFX
Numerical Method	Finite Volume	Finite Volume	Finite Volume	Finite Volume	Finite Element	Finite Volume
Turbulence Modeling Capability (range of models)	Eddy viscosity ϵ - k - ϵ and Reynolds stress	k - ϵ and Algebraic stress, Reynolds stress and RNG($V1Z$)	k - ϵ , low Reynolds No k - ϵ , Algebraic stress, Reynolds Stress, and Reynolds flux	k - ϵ	Mixing length (user subroutine) and k - ϵ	Mixing length (user subroutine) and k - ϵ
Compressible flow capability	Available (including supersonic)	Available	Available	Weakly compressible, Mach No up to 0.2	Not available	Available (including supersonic)
Non-Newtonian Modeling capability	Choice of models available, user subroutines	Power law and difficult to implement user subroutines	Choice of models available	Not Available	Power Law, Bingham, Generalized Power law, and Carreau, and user subroutines	Power Law, Bingham, Generalized Power law, and Carreau, and user subroutines
Multiphase flow capability	Available	Available	Available	Available	Available	Available
Free Surface capability	Available	Not Available	Limited	Available	Available	Available
Mesh generation features	Structured mesh/interactive mesh generation	Structured mesh	structured mesh Multiblock	Unstructured mesh, Multiblock interface to PATRAN and IDEAS	Unstructured	Unstructured mesh, Multiblock interface to PATRAN and IDEAS Unigraphics chemical reaction
Combustion Modeling capability	Combustion/ chemical reaction	Combustion/ chemical reaction	Combustion/ chemical reaction	Combustion/ chemical reaction	Simple combustion chemical reaction	Heat release
Target Application	General Purpose	General purpose	General Purpose	Main area of application is in heat and fluid in highly complex geometries.	General purpose	General purpose
Code extensibility	User supplied FORTRAN subroutines can be added.	Cannot add FORTRAN subroutines	User supplied FORTRAN subroutines can be added	User supplied FORTRAN subroutines can be added.	User supplied FORTRAN subroutines can be added.	User supplied FORTRAN subroutines can be added.
Note: PATRAN and IDEAS are software packages for mesh generation in relation to complex geometries for FE or unstructured FV codes.						

برای اکثر مسائل مهندسی شیمی، مدل آشفتگی $k-\epsilon$ قابل کاربرد است، اما در جریان‌های پیچیده و با سرعت، لازم است مدل‌های پیشرفته آشفتگی به کار برده شود. این قابلیت فقط در کدهای FLUENT، CFX، FLOW3D و PHOENICS موجود است.

کاربرد اصلی سیال تراکم‌پذیر به ویژه در سرعت‌های بالا در آیرودینامیک است و در مهندسی شیمی کاربرد کمی دارد. یکی از مهمترین قابلیت‌های این کدها از نظر مهندس شیمی، توانایی مدل کردن سیال‌های غیر نیوتنی است. اکثر کدها تنها از مدل‌های توانی و بی‌هنگام استفاده می‌کنند. اما این قابلیت در آنها پیش‌بینی شده است که مدل‌های دیگر توسط استفاده‌کننده به کد اضافه شود. در کد FIDAP مدل‌های مختلف سیال‌های غیر نیوتنی گنجانیده شده است.

مدل کردن جریان چند فازی و سطوح آزاد در طراحی تجهیزات فرایند بسیار مهم است. تعداد کمی از کدها دارای این توانایی هستند. و CFX، PHOENICS دارای سه مدل برای مدل کردن جریان چند فازی هستند. در آخرین سری FIDAP توانایی مدل کردن جریان چند فازی گنجانده شده است. ایجاد شبکه^۱ از مراحل مهم، مشکل و وقت‌گیر CFD است. این کار با دوروش شبکه بندی با سازمان^۲ و بدون سازمان^۳ انجام می‌شود. تمایل به استفاده از شبکه بندی بدون سازمان تطبیقی با حل^۴ تمام خودکار در حال افزایش است این نوع شبکه بندی سرعت حل مسائل را افزایش می‌دهد.

از نظر مهندسی شیمی، یکی دیگر از قابلیت‌های مهم کدهای CFD، توانایی مدل کردن جریان‌های با اجزای شیمیایی مختلف یا همراه با واکنش‌های شیمیایی است. تعداد اجزا و تعداد و نوع واکنش‌های شیمیایی که کد توانایی مدل کردن آنها را دارد، باید در نظر گرفته شود [۸].

۴. بررسی ظروف همزده با CFD

ظروف همزده^۵ از مناسب‌ترین دستگاه‌ها برای انتقال حرارت، اختلاط مواد، انتقال جرم میان فازهای گوناگون، انجام دادن واکنش‌های شیمیایی (به عنوان راکتور همزده و راکتور ناپیوسته) یا

۱. mesh generation

۲. Structured

۳. Unstructured

۴. Solution adaptive

۵. Agitated Vessels

رشد میکرو ارگانسیم‌ها (به عنوان فرماتور همزده) و... است. ظروف همزده کاربردهای فراوانی در صنایع شیمیایی دارد، به طوری که تخمین زده می‌شود بیش از ۵۰ درصد این صنایع، ظروف همزده مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱ و ۲].

علی‌رغم استفاده وسیع از این تجهیزات، پیچیدگی میان جریان به وجود آمده در آنها باعث عدم دستیابی به طراحی دقیق ظروف همزده شده است [۳ و ۴]. به علت دقیق نبودن طراحی همزن‌ها، سالانه هزینه‌های فراوانی - در حد - میلیارد دلار تلف می‌شود [۱ و ۶].

نویسندگان این مقاله برای حل این مشکل از CFD استفاده کرده‌اند. به این ترتیب که برای حالت یک فازی، معادلات پیوستگی و حرکت سیال در حالت بدون بعد با روش شبه گذرا حل شد. برای حل معاملات از روش علامتگذاری و سلول^۱ و شبکه بندی جایجا شده^۲ غیر یکنواخت استفاده شد. مزیت این روش عدم نیاز به شرایط مرزی برای فشار است، زیرا تعیین فشار به عنوان یکی از شرایط مرزی با استفاده از فیزیک مسئله کار بسیار دشواری است و معمولاً فشار در مناطق مختلف با استفاده از نتایج مسئله حل شده، تعیین شود. شرایط مرزی با استفاده از فیزیک مسئله و مقادیر اندازه گیری شده تعیین شد. برای تعیین میدان جریان فاز مایع در حالت دو فازی گاز - مایع، نتایج میدان یک فازی تصحیح شده و اثر فاز گاز به آن اضافه شد [۴].

با داشتن میدان فاز مایع در حالت دو فازی و محاسبه سرعت لغزشی میان حباب‌های گاز و فاز مایع، سرعت حرکت حباب‌های گاز درون ظرف همزده به دست آمد. سپس توزیع کسر حجمی حباب‌های گاز، ابعاد حباب‌ها، اثر حباب‌ها روی یکدیگر، تغییر شکل حباب‌ها و... بررسی شد. با استفاده از نتایج این مدل می‌توان یک راکتور یک فازی و فاز گاز - مایع یا بیوراکتور همزده را طراحی یا عملکرد آن را بررسی کرد [۱ و ۴].

۵. میدان جریان درون نیدرها

نیدر^۳ دستگاهی است که از یک لوله زائده دار^۴ و یک ماریچ^۵ ساخته شده است. ماریچ درون

۱. Marker And Cell

۲. Staggered Grid

۳. kneader

۴. Pin barrel

۵. Screw

لوله زائده دار، علاوه بر حرکت دورانی، دارای حرکت رفت و برگشت محوری است. قسمت مارپیچ این دستگاه از قطعه‌های گوناگونی ساخته می‌شود. هر یک از این قطعه‌ها عملیات ویژه‌ای روی سیال عبوری از درون نیدر انجام می‌دهند.

وجود قطعه‌های گوناگون با ترتیب‌های متفاوت و ترکیب دو حرکت دورانی و رفت و برگشت محوری، باعث پیچیده شدن میدان جریان سیال درون این دستگاه‌ها می‌شود. مطالعات انجام شده روی این تجهیزات هنوز کامل نشده است. و اطلاعاتی از جزئیات میدان سیال ارائه نمی‌دهد [۵]. نگارندگان این مقاله با کمک CFD میدان جریان درون این دستگاه را مورد بررسی قرار داده و جزئیات میدان سیال درون این دستگاه‌ها را تعیین کرده‌اند. [۵]

۶. پیشنهاد

پیشنهاد می‌شود که یک درس سه واحدی با عنوان "CFD کاربردی" برای دانشجویان سال چهارم کارشناسی مهندسی شیمی ارائه شود. محتوای این درس شامل مفاهیم اساسی مورد استفاده در حل عددی، روش‌های کلاسیک حل معادلات دیفرانسیل پاره‌ای با تاکید بر معادلات مورد توجه مهندسی شیمی و معرفی نرم افزارهای موجود است. یک درس سه واحدی در دوره کارشناسی ارشد به صورت انتخابی ارائه شود که در آن مباحث تکمیلی CFD مانند روش‌های پیشرفته حل معادلات انتقال، روش‌های تولید شبکه، جریان آشفته، جریان با واکنش شیمیایی و... گنجانده شده است.

پژوهش‌های مهندسی شیمی را به دو صورت می‌توان با CFD مرتبط کرد: در حالت اول، انجام دادن پژوهش‌هایی با هدف گسترش توانایی‌ها و کاربردهای CFD در مهندسی شیمی است. این کار که به تازگی در سایر کشورها آغاز شده، زمینه‌های پژوهشی وسیعی را برای محققان مهندسی شیمی ایجاد کرده است. در حالت دوم، از CFD به عنوان یک ابزار در پژوهش‌های مهندسی شیمی استفاده می‌شود. بدین ترتیب که کدهایی که قبلاً توسط خود محققان یا سایرین ارائه شده و دقت و صحت نتایج آنها به اثبات رسیده است، برای بررسی مسائل جدید مورد استفاده قرار گیرد. مزیت این روش سرعت، عدم محدودیت به مواد، شرایط عملیاتی، هندسه سیستم و... است.

۷. نتیجه گیری

هدف اصلی این مقاله نشان دادن قابلیت‌ها و مشکلات استفاده از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی برای حل مسائل مورد توجه مهندسان شیمی است و بنابراین، پیشنهاد شد که CFD هم از نظر آموزشی و هم از نظر پژوهشی مورد توجه بیشتری قرار گیرد. این کار در سایر کشورها آغاز شده است و ضروری است که در ایران نیز به آن توجه شود.

مراجع

۱. فرامرز هرمزی، مطالعه نظری و تجربی هیدرو دینامیک ظرف همزده گاز- مایع، پیشنهاد رساله دوره دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، مصوب تابستان ۱۳۷۶.
۲. سید مهدی علایی، بهرام دبیر، مهدی اشجعی و فرامرز هرمزی، تعیین میدان جریان پروانه توربینی با پره‌های زاویه دار درون ظرف همزده، چهارمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران، دانشگاه صنعتی شریف، اسفند ۱۳۷۷.
۳. فرامرز هرمزی، سید مهدی علایی و بهرام دبیر و مهدی اشجعی، میدان ظروف همزده با پروانه‌های توربینی، Rushton پنجمین کنگره مهندسی شیمی ایران، دانشگاه شیراز، اردیبهشت ۱۳۷۹.
۴. فرامرز هرمزی، بهرام دبیر، سید مهدی علایی و مهدی اشجعی، "میدان جریان گاز مایع درون همزده"، مجله مهندسی شیمی ایران.
۵. فرامرز هرمزی، بهرام دبیر، میدان جریان درون نیدرها (چاپ نشده).
6. A. Brucato et al, Numerical prediction of flow fields in baffled stirred Vessels, Chem. Eng. Sci., Vol.53, 3653-3684, 1998.
7. C.K. Harris et al, Computational fluid dynamics for chemical reactor engineering, Chem. Eng. Sci, Vol.51, 1569-1564, 1996.
8. N.Dombrowski et al, Know the CFD Codes, Chem. Eng. Prog., PP. 46, September 1993.