

مدل سازی محاسباتی جریان در مهندسی راکتورهای شیمیایی

جلد اول (اصول دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) در راکتورهای شیمیایی)

تالیف:

یوک.ه. رائد

ترجمه:

مهندس ابودر آذرافزا

دکتر شاهرخ شاه حسینی

عضو هیئت علمی دانشگاه علم و صنعت

سرشناسه

: راناد، ویوک وی.

Ranade.Vivek V

عنوان و پدیدآور

:مدلسازی محاسباتی جریان در مهندسی راکتورهای شیمیایی

: مشخصات نشر

: تهران-میدان رسالت-خ هنگام-خ دانشگاه علم و صنعت ایران- دانشگاه علم

و صنعت ایران-اداره انتشارات: دانشگاه علم و صنعت ایران، ۱۳۹۴.

مشخصات ظاهری

: ۶۵۲ ص: مصور، جدول، نمودار

شابک

: جلد اول ۳-۲۹۲-۴۵۴-۹۶۴-۹۷۸

وضعیت فهرست نویسی: فیبا مختصر

: یادداشت فهرست نویسی کامل این اثر در نشانی: <http://opac.nlai.ir> قابل دسترسی است.

شناسه افزوده

: شاه حسینی، شاهرخ، ۱۳۴۲، مترجم

شناسه افزوده

: مهندس آذرافزا، ابوذر، ۱۳۶۱، مترجم

شماره کتابشناسی ملی: ۳۸۱۲۷۴۸

تفصیلات:



• مرکز انتشارات دانشگاه علم و صنعت ایران- تهران- نارمک صندوق پستی

۱۶۸۴۶۱۳۱۱۴ تلفن ۷۷۱۰۰۱- دوزنویس: ۷۷۲۴۰۲۲۵

• فروشگاه: میدان رسالت- خیابان هنگام- خیابان دانشگاه- دانشگاه علم و صنعت

ایران- تلفن ۷۷۲۴۰۳۸۳

• پست الکترونیک: Publication@sn.iut.ac.ir

نام کتاب: مدلسازی محاسباتی جریان در مهندسی راکتورهای شیمیایی (جلد اول)

تألیف: راناد، ویوک وی.

مترجمین: دکتر شاهرخ شاه حسینی و مهندس ابوذر آذر افزا

چاپ اول: ۱۳۹۶

شمارگان: ۳۰۰

قیمت: ۲۵۰۰۰۰ ریال

شماره انتشارات: ۵۳۹

ویراستار: محمدرضا موسوی

لیتوگرافی، چاپ و صحافی: مرکز انتشارات دانشگاه علم و صنعت ایران

ISBN: 978-964-454-292-3

شابک: ۳-۲۹۲-۴۵۴-۹۶۴-۹۷۸

عنوان

صفحه

I	پیش گفتار مولف
II	پیش گفتار مترجمین
۱	فصل اول
۱	مهندسی راکتور و مدل سازی جریان
۶	۱-۱-۱-۱ مهندسی راکتورهای شیمیایی (CRE)
۲۴	۱-۲-۱-۱ مدل سازی محاسباتی جریان (CFM)
۳۴	۱-۳-۱-۱ مدل سازی محاسباتی جریان در مهندسی راکتورهای شیمیایی
۴۴۳	فصل دوم
۴۴	مدل سازی ریاضی فرآیندهای جریان
۴۴	۱-۱-۱-۱ معادلات حاکم بر جریان
۴۶	۱-۱-۱-۱-۱ بقای جرم
۴۸	۱-۱-۱-۲-۱ بقای مومنتم
۵۰	۱-۱-۲-۳-۱ بقای انرژی
۵۱	۱-۲-۴-۱ تحلیل/ساده سازی معادلات حاکم
۵۶	۱-۲-۲-۲ معادلات کمکی
۵۹	۱-۲-۳-۲ شرایط مرزی
۶۰	۱-۳-۱-۲ شرط مرزی ورودی
۶۳	۱-۳-۲-۲ شرط مرزی خروجی
۶۴	۱-۳-۳-۲ شرط مرزی دیواره
۶۶	۱-۳-۴-۲ شرایط مرزی تقارن/تناوب/تکرار
۶۸	۱-۴-۲-۲ بحث

۷۰.....	۲-۵- خلاصه فصل
۷۱.....	فصل سوم
۷۱.....	فرآیندهای جریان آشفته
۷۱.....	۳-۱- مقدمه
۷۲.....	۲-۲- آشفتگی : تجسم فیزیکی
۷۲.....	۱-۲-۱- رویکرد آماری
۷۵.....	۱-۲-۲- رویکرد ساختاری
۷۶.....	۳-۲-۱- رویکرد مدلی
۷۷.....	۳-۳- رویکردهای مدل سازی
۸۰.....	۳-۳-۱- شبیه سازی عددی مستقیم (DNS)
۸۱.....	۳-۳-۲- شبیه سازی گردابه ننگ (LES)
۸۴.....	۳-۳-۳- میانگین رینولدز معادلات ناویر-استوکس (RANS)
۸۷.....	۳-۴- مدل های آشفتگی بر پایه RANS
۸۸.....	۳-۴-۱- مدل های لزجت گردابه
۹۸.....	۳-۴-۲- مدل های تنش رینولدز
۱۰۴.....	۳-۴-۳- مدل های انتقال اسکالر
۱۰۷.....	۳-۵- خلاصه فصل
۱۰۹.....	فصل چهارم
۱۰۹.....	فرآیندهای جریان چند فازی
۱۰۹.....	۴-۱- مقدمه
۱۱۰.....	۴-۱-۱- انواع جریان های چند فازی
۱۱۲.....	۴-۱-۲- رویکردهای مدل سازی

۱۱۶.....	۲-۴- مدل سازی جریان های چند فازي پراکنده
۱۱۹.....	۱-۲-۴- رویکرد حجم سیال (VOF)
۱۲۲.....	۲-۲-۴- رویکرد اوپلری - لاگرانژی
۱۳۵.....	۳-۲-۴- رویکرد اوپلری - اوپلری
۱۵۲.....	۳-۴- سایر انواع جریان های چند فازي
۱۵۲.....	۱-۳-۴- فرآیندهای جریان در محیط های متخلخل
۱۵۴.....	۲-۴- جریان های چند فازي جدا
۱۵۵.....	۱-۴- نرصة فصل
۱۵۶.....	فصل پنجم
۱۵۶.....	۱-۵- مقدمه
۱۵۸.....	۲-۵- اختلاط واکنشی آفته
۱۶۷.....	۳-۵- رویکردهای مدل سازی
۱۶۹.....	۱-۳-۵- شبیه سازی عددی مستقیم (DNS)
۱۷۱.....	۲-۳-۵- شبیه سازی گردابه بزرگ (LES)
۱۷۲.....	۳-۳-۵- مدل های بر پایه RANS
۱۷۳.....	۴-۵- مدل های بر پایه RANS فرآیندهای جریان واکنش
۱۷۶.....	۱-۴-۵- مدل های بستار / مدل های بر پایه PDF
۱۸۲.....	۲-۴-۵- مدل های پدیده شناختی (غیر PDF)
۱۸۶.....	۵-۵- فرآیندهای جریان واکنشی چند فازي
۱۹۱.....	۶-۵- خلاصه فصل
۱۹۳.....	فصل ششم
۱۹۳.....	۱-۶- مقدمه
۱۹۵.....	۲-۶- روش حجم محدود

۱۹۷.....	۶-۲-۱- گسسته سازی معادلات حاکم مدل
۲۰۸.....	۶-۲-۲- حل معادلات جبری
۲۱۳.....	۶-۳- روش حجم محدود برای محاسبه میدان جریان
۲۱۴.....	۶-۳-۱- آرایش شبکه همجوار و جابجا شده
۲۱۶.....	۶-۳-۲- الگوریتم های مورد استفاده جهت حل توام سرعت - فشار
۲۲۲.....	۶-۳-۳- نحوه پیاده سازی شرایط مرزی
۲۲۴.....	۶-۴- روش حجم محدود برای جریان های غیردائم
۲۲۸.....	۶-۵- کاربرد روش حجم محدود
۲۳۱.....	۶-۵-۱- روش ساده حل و شبکه محاسباتی
۲۳۳.....	۶-۵-۲- همگرایی و تحلیل خطا
۲۳۷.....	۶-۵-۳- شبیه سازی سیال با اجزای پایین
۲۴۰.....	۶-۶- خلاصه فصل
۲۴۵.....	فصل هفتم
۲۴۵.....	۷-۱- شبیه سازی جریان های آشفته
۲۵۵.....	۷-۲- شبیه سازی جریان های چند فازي
۲۵۵.....	۷-۲-۱- رویکرد حجم سیال (VOF)
۲۶۱.....	۷-۲-۲- رویکرد اوپلری - لاگرانژی
۲۷۱.....	۷-۲-۳- رویکرد اوپلری - اوپلری
۲۸۵.....	۷-۳- شبیه سازی جریان های واکنشی
۲۹۰.....	۷-۴- موارد خاص
۲۹۰.....	۷-۴-۱- هندسه های پیچیده
۲۹۵.....	۷-۴-۲- بهبود عملکرد همگرایی
۲۹۷.....	۷-۴-۳- تحلیل خطای مربوط به شبیه سازی های پیچیده

۳۰۰	۵-۷- خلاصه فصل
۳۰۱	فصل هشتم
۳۰۱	۸-۱- نگاشت یک مدل محاسباتی جریان به یک کامپیوتر
۳۰۷	۸-۲- پیش پردازش گرها
۳۱۱	۸-۳- حلگرها
۳۱۵	۸-۴- پس پردازش گرها
۳۱۷	۸-۵- خلاصه فصل
۳۱۹	نمادها، حروف اختصاری
۳۲۵	حروف اختتامی منوال
۳۲۷	منابع و مراجع

پیش گفتار مولف

گروه مدل سازی جریان های صنعتی در آزمایشگاه ملی شیمی، پروژه های تحقیقاتی و مشاوره ای مختلفی در حوزه های عمومی مهندسی راکتور را متقبل می شود. ما برای انجام این پروژه های صنعتی از مدل سازی محاسباتی جریان استفاده می کنیم. مدل سازی محاسباتی جریان، ابزار توانایی در طراحی و تحلیل فرآیندهای جریان های صنعتی محسوب می گردد. با وجود آنکه از این ابزار به طور روزمره به عنوان یک ابزار طراحی در مهندسی هوا فضا استفاده می شود، با این حال، مهندسان شیمی تنها در سالیان اخیر، استفاده از توانایی های این ابزار قدرتمند را آغاز نموده اند. با توجه به نقش محوری راکتورها در صنایع فرآیندهای شیمیایی، پتانسیل قابل توجهی برای به خدمت گرفتن ابزارهای مدل سازی جریان به منظور بهبود مهندسی راکتورها وجود دارد.

تعاملات صوت گرفتار با مهندسان فعال در صنایع، نشان می دهد که تلاش های کافی به منظور به خدمت گرفتن و به اشتراک قرار دادن ابزارهای مدرن مدل سازی محاسباتی جریان برای کاربردهای پیچیده مهندسی راکتورهای صنعتی، صورت نگرفته است. بسیاری از مهندسان راکتور بر این باورند که به سبب پیچیدگی های موجود در راکتورهای صنعتی، شبیه سازی آنها غیر ممکن بوده و یا از سویی دیگر، انتظار معجزه از ابزارهای تجاری داده های محاسباتی جریان را دارند. این دو نوع نگرش متفاوت، از عدم تعامل کافی و مناسب بین محققان حوزه مدل سازی جریان و مهندسان راکتورهای صنعتی ناشی می شود. بنابراین، لازم است که نقش مدل سازی جریان در مهندسی راکتور به روشنی مشخص گردد. همچنین ضروری است که هر یک از جنبه های مهندسی راکتور و مدل سازی محاسباتی جریان را به شکلی منسجم و یکپارچه به هم مرتبط ساخت تا استفاده از توان بالقوه مدل سازی محاسباتی جریان در مهندسی راکتور و پژوهش های مرتبط با آن تحقق پیدا کند. به طور باری رساندن به مهندسان راکتور در ارتباط با جنبه های مختلف، کارگاه هایی در زمینه «مدل سازی محاسباتی جریان برای صنایع فرآیندهای شیمیایی»، در آزمایشگاه ملی شیمی آغاز گردید. استقبال خوب صورت گرفته از این کارگاه های آموزشی، مشوق اصلی اینجانب در نوشتن کتاب حاضر بوده است. به در واقع، شکل گسترده و انسجام یافته مطالب ارائه شده در آن کارگاه ها می باشد. در این کتاب، سعی نموده ام که اطلاعات کافی به منظور شناخت و تعیین نقش ویژه و محوری مدل سازی محاسباتی جریان در کاربردهای مهندسی راکتور را فراهم نمایم تا با انتخاب ابزارهای مناسب و اعمال آنها، بتوان ارتباطی بین اجزای راکتور و عملکرد آن، برقرار ساخت. مهندسان شیمی فعال در صنایع، محققان حوزه مهندسی شیمی و دانشجویانی که در زمینه مهندسی راکتور به پژوهش مشغول هستند، مستمعین اصلی این کتاب

می‌باشند. فرض شده است که خواننده، از پیش زمینه قبلی در حوزه مهندسی راکتور و تکنیک‌های عددی نیز برخوردار است.

مطالب کتاب به نحوی تنظیم شده است تا وظیفه اصلی مهندس راکتور که در واقع، برقراری ارتباطی بین اجزای راکتور و عملکرد آن می‌باشد، را تسهیل سازد. سعی شده است که مراحل مختلف جهت نیل به این هدف، مورد بحث قرار گیرد تا نقش مدل‌سازی محاسباتی جریان در حوزه کلی مهندسی راکتور، به روشنی تعیین گردد. لزوم استفاده از سلسله‌مراتبی از ابزارهای مدل‌سازی و ایجاد ارتباطی روشن بین اهداف مهندسی راکتور و مدل محاسباتی جریان به کمک مثال‌های متعدد، مورد تاکید قرار گرفته است. روش کلی دستیابی به اهداف مدنظر در مهندسی راکتور از طریق مدل‌سازی محاسباتی، ریزان بحث شده است. علاوه بر این، به مشخصات مطلوب و موضوعات مهم در انتخاب کدهای دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) به اختصار پرداخته شده است. همچنین تعدادی مثال و مورد مطالعاتی نمونه از چهار نوع عمده راکتورهای مورد استفاده در صنایع شیمیایی شامل راکتورهای همزن‌دار، راکتورهای سرن‌جری، راکتورهای بستر سیال و راکتورهای بستر ثابت در کتاب گنجانده شده است. طبیعتاً با توجه به گستردگی وسیع انواع راکتورها، امکان پوشش کلیه انواع راکتورها و جریان‌های مرتبط با آنها در یک کتاب امکان‌پذیر نیست. تاکید بر برخی موضوعات و انتخاب مثال‌ها، به نحوی جهت‌دار بوده و مستقیماً به تجربه‌ی پژوهش و مشاوره‌ای اینجانب مربوط می‌گردد. برخی موضوعات از قبیل انتقال حرارت تابشی، جریان‌های واکنشی آرام به طور کامل حذف شده‌اند. تمام کوشش خود را به کار بسته‌ام تا طرحی کلی ایجاد نمایم که به منظور حل مسائل عملی مهندسی راکتور مفید واقع گردد. همچنین توضیحاتی در ارتباط با روند آتی مدل‌سازی محاسباتی جریان و کاربرد آن در جامعه مهندسی شیمی ارائه شده است.

از مطالب بیان شده در کتاب می‌توان به شیوه‌های مختلف و در مراحل گوناگون انجام پروژه‌های مدل‌سازی جریان استفاده نمود. می‌توان آن را به عنوان یک مرجع اصلی برای اخذ تصمیم‌های مناسب در حوزه به کارگیری دینامیک سیالات محاسباتی در مهندسی راکتور به کار گرفت. همچنین می‌توان آن را به عنوان منبع مطالعاتی برای یادگیری به صورت فردی، به منظور تسهیل در درک ارزش و کاربرد مدل‌سازی محاسباتی جریان در مهندسی راکتور به کار گرفت. علاوه بر این، می‌توان از مطالب ارائه شده به عنوان کتابی کمکی، حین حل مسائل عملی مهندسی راکتور استفاده نمود. امید است کتاب حاضر، مشوقی برای مهندسان شیمی در بهره‌برداری از توان بالقوه مدل‌سازی محاسباتی جریان باشد و در نهایت، به مهندسی بهتر راکتورها منجر شود.

کتاب حاضر، عمدتاً حاصل پانزده سال تجربیات اخیر اینجانب در ارتباط با مدل‌سازی محاسباتی جریان در مهندسی راکتورها است. در این سال‌ها، کمک‌های قابل توجهی از افراد مختلف دریافت نمودم که در تنظیم و اصلاح دیدگاه‌های بنده در زمینه مدل‌سازی محاسباتی جریان و

مهندسی راکتورهای شیمیایی موثر واقع گردید. در این بین، به طور ویژه، مدیون استاد و مربی‌ام پروفیسور ج. ب. جوشی^۱ هستم که به یقین، یکی از فعالان عمده در زمینه دینامیک سیالات فرآیندی در سه دهه گذشته محسوب می‌گردد. به طور قطع نمی‌توانم با بیان کلماتی چند، از سهم و نقش ویژه وی در نگارش این کتاب قدردانی به عمل آورم. همچنین این فرصت را داشتم که با دکتر ر. و. چادهاری^۲ و دکتر ر. آ. ماشلکار^۳ در آزمایشگاه ملی شیمی کار کنم. هر دو آنها همواره تمام تلاش خود را در پشتیبانی و تشویق بنده ابراز داشتند. بدون حمایت همه جانبه آنها، امکان توسعه فعالیت‌های مدل‌سازی جریان‌های صنعتی که اساس این کتاب را شامل می‌شود، امکان‌پذیر نبود. همچنین مایلم که قدردانی خود را از پشتیبانی پروفیسور ه. ای. آ. فان دن آکر^۴ از دانشگاه صنعتی دلفت^۵ و پروفیسور ج. ف. ورستیگ^۶ ج. ا. م. کوپرز^۷ از دانشگاه توتنه^۸ هلند داشته باشم. اقامت کوتاه مدت بنده در آزمایشگاه پروفیسور ر. فان دن آکر در دلفت و آشنایی‌ام با انواع حلگرهای تجاری مختلف، افق‌های جدیدی را در زمینه مدل‌سازی حساسات جریان بر من گشود. ایده نگارش چنین کتابی در بازدید دوم اینجانب از دانشگاه توتنه در هلند شکل گرفت. در اینجا مایلم تا از دکتر بهاراتان پاتل^۹ از شرکت تجاری فلوئنت^{۱۰} و آقای پارش پاتل^{۱۱} مرکز نمایندگی فلوئنت در هند به دلیل حمایت بی دریغ آنها سپاسگزاری نمایم.

سپاسگزار همه همکاران و دوستان خود هستم که در انجام پروژه‌های مختلف با آنها همکاری نموده‌ام. به طور ویژه و به میزان زیادی مدیون پروفسور جی. ر. بورنه^{۱۲} و مهندس وایبهاو دشیپانده^{۱۳} و خانم س.م.س. دومتی^{۱۴} و آقای یاتین تایالیا^{۱۵} و همچنین دانشجویانم به ویژه کاپیل گیروترا^{۱۶}، آشوین سونتانکار^{۱۷}، رانجیت اوتیکار^{۱۸}، آراویند راموهان^{۱۹}، زاشین مثنیان^{۲۰}، آویناش کوپکار^{۲۱}، پراشانت

^۱ - J.B. Joshi

^۲ - R.V. Chaudhari

^۳ - R.A. Mashelkar

^۴ - H.E.A. van den Akker

^۵ - Delft university of technology

^۶ - G.F. Versteeg

^۷ - J.A.M. Kuipers

^۸ - Twente university

^۹ - Bharatan Patel

^{۱۰} - Fluent Inc

^{۱۱} - Parash Patel

^{۱۲} - J.R. Bourne

^{۱۳} - Vaibhav Deshpande

^{۱۴} - S.M.S. Dommeti

^{۱۵} - Yatin Tayalia

^{۱۶} - Kapil Girotra

^{۱۷} - Ashwin Sunthakar

^{۱۸} - Ranjit Utikar

^{۱۹} - Aravind Rammohan

^{۲۰} - Sachin Muthian

^{۲۱} - Avinash Khopkar

گونجال^۱، ویوک بووا^۲ و شیشیر سابله^۳ هستیم که هر یک به شیوه‌های مختلف در ارائه این کار سهم داشتند که خود شامل کمک‌های فنی مستقیم و یا غیر مستقیم، کمک به جمع‌آوری اطلاعات مورد نیاز و مطالعه پیش نویس کتاب است. همچنین پدرم آقای و. ب. راناد^۴ نیز، با دقت و مشقت زیادی، پیش نویس کتاب را مطالعه و پیشنهادهایی جهت بهبود نحوه بیان مطالب به بنده ارائه نمودند. با اعمال این پیشنهادهای، پیش نویس کتاب اصلاح و بهبود یافت. بدون شک، هر نوع اشتباه یا کاستی احتمالی متوجه نویسنده است. در نهایت، آرزو مندم که از همسرم ناندا^۵، به جهت صبر، درک و حمایت بی‌دریغش تشکر نمایم که بنده را در طی فرآیند دشوار نگارش کتاب همراهی و یاری نمود.

ویوک ب. راناد

پونه

^۱ - Prashant Gunjal

^۲ - Vivek Buwa

^۳ - Shishir Sable

^۴ - V.B. Ranade

^۵ - Nanda