

مروری بر روش‌های شبیه‌سازی CFD جریان‌های واکنش دار مغشوش

امیر حیدری^۱، سید حسن هاشم‌آبادی^{۲*}

۱- سمنان، دانشگاه سمنان، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

۲- تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، آزمایشگاه دینامیک سیالات محاسباتی

پیام‌نگار: hashemabadi@iust.ac.ir

چکیده

در این تحقیق سعی شده است تا با ارائه و بررسی دیدگاه‌های شبیه‌سازی CFD جریان‌های واکنش دار، مدل‌ها و تأثیراتی که وجود واکنش در شبیه‌سازی CFD این دسته از فرایندها به همراه دارند مورد مطالعه قرار گیرد. مطالب ارائه شده در این تحقیق شامل دیدگاه‌های شبیه‌سازی فرایندهای واکنش دار مغشوش بر اساس مدل‌های RANS، LES و DNS و همچنین نحوه شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی بر اساس دیدگاه‌های VOF، اولری-اولری و اولری-لاگرانژی می‌باشد. همچنین به طور خاص به بررسی دیدگاه‌های شبیه‌سازی فرایندهایی که در آنها سرعت واکنش نسبت به سرعت اختلاط بالا می‌باشد و مدل‌های پرکاربرد در زمینه شبیه‌سازی این دسته از فرایندها همراه با محدوده قابل قبول استفاده هر یک ارائه گردیده است. بررسی مدل‌های تابع توزیع احتمال (PDF) که در آنها اثر جمله واکنش از معادلات حاکم حذف می‌گردد و همچنین مدل‌های پدیده‌شناسی (غیر PDF) که بر اساس غالب بودن مقیاس زمانی میکرواختلاط نسبت به مقیاس زمانی انجام واکنش ارائه شده‌اند در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته است.

کلمات کلیدی: روش CFD، اغتشاش، مدل چند فازی، واکنش سریع، میکرواختلاط، مدل‌های تابع توزیع احتمال،

مدل‌های پدیده‌شناسی

۱- مقدمه

سال‌های اخیر بیشتر تحقیقات انجام شده در زمینه شبیه‌سازی جریان‌های واکنش دار بیشتر در قالب شبیه‌سازی فرایندهای صنعتی و براساس مدل‌های ارائه شده در زمینه شبیه‌سازی دینامیک سیال و تصحیح ثوابت مدل‌های سیالاتی برای فرایند مورد بررسی تمرکز یافته است. این دسته از شبیه‌سازی‌ها به‌طور خاص به منظور شناخت و بهبود عملکرد همان فرایند دارای کاربرد می‌باشند. با توجه به رشد و توجه روز افزون شبیه‌سازی‌های فرایندها در صنایع شیمیایی به منظور بررسی رفتار فرایند و بهینه‌سازی آن، ابزارهای متفاوتی برای مدل‌سازی سینتیک شیمیایی و واکنش‌ها ارائه شده است به طوری که این ابزارها سهم اصلی در مهندسی

امروزه شبیه‌سازی فرایندهای جریان‌های واکنش دار به کمک روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) به منظور شناخت اثرات هندسه محیط واکنش و نحوه توزیع غلظت اجزاء در نحوه عملکرد رآکتورها و بهینه‌سازی فرایند مورد توجه مهندسين می‌باشد. قابلیت روش CFD در شبیه‌سازی فرایندهایی شیمیایی واکنش دار به طور خاص از دهه ۹۰ مورد توجه قرار گرفته که در این میان مدل‌ها و رهیافت‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی پدیده‌های سیالاتی در بیان نحوه توزیع غلظت و سرعت واکنش، مانند بیان جمله واکنش به عنوان تابعی از انرژی جنبشی (k) و اتلاف (ε)، توسعه یافته است. در

که راکتور نامیده می‌شود می‌تواند محیطی تک‌فاز (هموژن) یا چند فاز (غیر هموژن) باشد. با توجه به ساختار راکتور و محیط انجام واکنش می‌توان پیچیدگی‌های دینامیک سیالاتی فرایند را تصور نمود. مهندس راکتور در این زمان با مجموعه‌ای از سوالات در برقراری ارتباط میان سخت افزار راکتور، پروتکل عملیاتی و عملکرد راکتور همراه با اثر دینامیک سیال نسبت به مطالعه و شبیه‌سازی جریان‌های غیر واکنش‌دار مواجه خواهد شد. این سوالات را می‌توان در سه گروه طبقه‌بندی نمود [۲]:

- کدام واکنش‌های شیمیایی انتظار می‌رود که روی دهند؟
- تغییرات در سیستم چقدر سریع می‌باشند؟
- بهترین راه برای انجام واکنش شیمیایی کدام است؟

مسئله اول مربوط به شیمی و ترمودینامیک فرایند است. دانش شیمی و مکانیسم واکنش به منظور تعیین واکنش‌های شیمیایی محتمل، مفید است. ترمودینامیک، ارائه‌کننده ابزار و مدلی به منظور تخمین انرژی‌های آزاد و گرمای تشکیل مواد می‌تواند باشد. این ابزارها به مهندس راکتور کمک می‌کنند تا بتواند شرایط عملیاتی مورد نظر را از لحاظ ترمودینامیکی تعیین نماید. تئوری‌ها و ابزارهای مدل‌سازی برای برشمردن این اثرات دارای توسعه یافتگی مناسبی نمی‌باشند و هیچگونه بررسی سخت افزاری، راکتور واقعی و مبانی ترمودینامیک را شامل نمی‌شوند. اطلاعات بیشتر در مورد ترمودینامیک واکنش‌های شیمیایی را می‌توان در کتابهای اسمیت و ونس [۳]، سندلر [۴] و کتابهای مشابه دیگر یافت. ترمودینامیک ارائه‌کننده تخمینی برای خواص فیزیکی (مانند چگالی، انحلال‌پذیری، فشار بخار و غیره) و حالت انتقال اجزا در هنگام شرایط عملیاتی می‌باشد.

سوال دوم شامل دانش شیمی، سینتیک واکنش و فرایندهای مختلف انتقال مانند اختلاط، حرارت و جرم می‌شود. آنالیز فرایندهای انتقال و برهمکنش آن‌ها با واکنش‌های شیمیایی می‌تواند بسیار مشکل باشد که به طور شدیدی با مبانی دینامیک سیالات آمیخته است. چنین آنالیز ترکیبی شیمی و فرایندهای فیزیکی تشکیل دهنده هسته مهندسی واکنش‌های شیمیایی می‌باشند. نکته مهمی که می‌بایست به آن توجه نمود این است که سرعت سینتیک یک واکنش شیمیایی یک خاصیت ذاتی واکنش است و تابعیت از فرایندهای فیزیکی مانند اختلاط و انتقال جرم یا حرارت ندارد. بنابراین سرعت واکنش می‌بایست یک مقدار محلی یا نقطه‌ای باشد

واکنش‌های شیمیایی معمول را به خود اختصاص داده‌اند [۱]. بیشتر مدل‌هایی که در این گروه قرار می‌گیرند دارای فرضیات ساده‌سازی بزرگ هنگام برخورد با اثر دینامیک سیال درون راکتور، همانند نحوه توزیع غلظت و حرارت بر اثر رفتار اغتشاش میدان جریان در نواحی مختلف راکتور به ویژه در مقیاس کوچک و محلی می‌باشند. برای یک فرایند شیمی/کاتالیستی مشخصه عملکرد راکتور تابع پیچیده‌ای از اصول پدیده‌های انتقال می‌باشد. در مهندسی واکنش مرسوم، آزمایش و روش‌های نیمه تئوری (مانند شبیه‌سازی جریان سرد یا مطالعه ردیاب) به منظور برقراری ارتباط میان دینامیک سیال و اختلاط میان سخت افزار راکتور و پارامترهای عملیاتی مورد استفاده قرار می‌گیرد. اطلاعات قابل دسترسی از این روش‌ها معمولاً توضیح‌دهنده شکل پارامتری کلی و عمومی فرایند می‌باشد. این روش باعث پنهان ماندن اطلاعات محلی در مورد اغتشاش و اختلاط که در نهایت تعیین کننده عملکرد راکتور است می‌گردد. رهیافت مرسوم در شبیه‌سازی فرایندها در مهندسی واکنش ذاتاً متکی بر تجربه قبلی و روش‌های سعی و خطا به منظور توسعه دادن سخت‌افزار مناسب راکتور می‌باشد. امروزه ضروری است که روش‌ها و ابزارهای بهتر به منظور مرتبط کردن سخت‌افزار راکتور با دینامیک سیالات و پدیده‌های انتقال منتج از آن توسعه داده شود. در این میان ابزار CFD با توجه به قابلیت آن در بیان آنچه که روش‌های پیشین دارای ضعف بوده و توانایی ارائه اطلاعات محلی را به طور دقیق نداشته‌اند، همانند اختلاط، می‌تواند به عنوان برترین روش مدل‌سازی و مطالعه جریان‌های واکنش‌دار مورد بررسی علمی قرار گیرد [۲].

در این تحقیق سعی شده است تا با گردآوری روش‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی دینامیک سیالات به کمک روش CFD به توانایی و معایب این روش‌ها در شبیه‌سازی فرایندهای جریانی دارای واکنش، واکنش‌های سریع و آرام، پرداخته شود.

۲- مطالعه جریان‌های واکنش‌دار

وظیفه مهندسی راکتور شیمیایی به مهندسی تبدیلات شیمیایی مربوط می‌شود. تبدیلات شیمیایی یا واکنش‌ها فقط هنگامی روی می‌دهند که مولکولهای واکنش‌دهنده بتوانند در یک محیط مناسب (از نظر دمایی، غلظت، کاتالیست و شرایط دیگر) در یک زمان مناسب در تماس با یکدیگر قرار گیرند (اختلاط). این محیط مناسب

اعتبارسنجی گسترده و سرعت بالا در محاسبات عددی به طور گسترده‌ای در شبیه‌سازی رفتار دینامیکی سیالات مورد استفاده قرار گرفته‌اند. اعتبار سنجی‌های انجام شده مدل‌های RANS در زمینه دینامیک سیالات باعث شده است که این دسته از مدل‌ها به طور خاصی در شبیه‌سازی فرایندهای جریانی واکنش‌دار مورد استفاده قرار گیرد که برخی از شبیه‌سازی‌های صورت گرفته توسط این روش عبارتند از:

- مطالعه واکنش جت گاز با مایع [۶].
 - شبیه‌سازی کراکینگ در راکتور FCC [۷].
 - شبیه‌سازی واکنش همگن در راکتور لوله‌ای [۸].
- ماهیت مدل‌های اغتشاش RANS بر اساس متوسط گیری زمانی جملات موجود در معادلات حاکم در سیستم و ارائه مدلی برای جملات حاصل به منظور بستن مجموعه معادلات حاصل می‌باشد. در این میان کیفیت بیان و ارائه مدلی برای جملات ظاهر شده بر اثر متوسط گیری که در واقع ناشی از وجود مغشوشی جریان می‌باشد، به طور قابل توجهی باعث تغییر دقت نتایج حاصل از شبیه‌سازی خواهد شد. برای مثال موازنه جزء k با غلظت C_k پس از انجام متوسط گیری زمانی برابر خواهد بود با [۱]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{C}_k) + \nabla \cdot (\rho \bar{U} \bar{C}_k + \rho \bar{u}' C_k') = \nabla \cdot (\bar{J}_k) + \bar{S}_k \quad (1)$$

همان‌طور که ذکر شد مسئله اصلی در روش‌های RANS ارائه مدلی برای جملات ظاهر شده به علت متوسط گیری می‌باشد. در معادله فوق جملاتی حضور دارند که برای بستن معادلات بایستی تعریف شوند. این جملات شامل جمله فلاکس مغشوش جزء k ، $\bar{u}' C_k'$ و سرعت متوسط واکنش، \bar{k} می‌باشند. فلاکس مغشوش به وسیله انتقال به علت نوسانات سرعت در ناحیه اینرسی طیف انرژی حاکم می‌شود [۲]. مدل نفوذ گرادیان اغلب به منظور ارتباط فلاکس مغشوش به میدان متوسط استفاده می‌گردد:

$$\bar{u}' C_k' = \frac{\nu_T}{\sigma_{TK}} \nabla \cdot (\bar{C}_k) \quad (2)$$

که در آن ν_T نفوذ ممنتوم مغشوش و σ_{TK} عدد اشمیت مغشوش برای جزء k می‌باشد. اگرچه رابطه (۲) ممکن است در بعضی از موارد کارایی نداشته باشد اما عموماً در شبیه‌سازی مهندسی جریان‌های پیچیده واکنش‌دار استفاده می‌گردد [۲].

که با حجم دیفرانسیلی مخلوط واکنش حول نقطه مورد نظر ارتباط دارد. بنابراین به منظور محاسبه سرعت ذاتی یک واکنش می‌بایست اثرات پدیده‌های فیزیکی را از داده‌های آزمایشگاهی اندازه‌گیری شده جدا نمود. البته باید ذکر کرد که چنین کاری بسیار مشکل است. اطلاعات بیشتر در زمینه سینتیک ذاتی واکنش‌ها را می‌توان در کتاب‌های اسمیت [۵] و لوشپیل [۲] جستجو نمود.

برای یک فرایند شیمی/کاتالیستی مشخص عملکرد راکتور تابع پیچیده‌ای از اصول پدیده‌های انتقال می‌باشد. در مهندسی واکنش مرسوم، آزمایش و روش‌های نیمه نظری (مانند مطالعه ردیاب) به منظور برقراری ارتباط میان دینامیک سیال و اختلاط میان سخت‌افزار راکتور و پارامترهای عملیاتی مورد استفاده قرار می‌گیرد. اطلاعات قابل دسترسی از این روش‌ها معمولاً توضیح دهنده شکل پارامتری کلی و عمومی فرایند است. این روش باعث پنهان شدن اطلاعات محلی در مورد توربالنسی و اختلاط که در نهایت تعیین‌کننده عملکرد راکتور است خواهد گردید. این رهیافت ذاتاً متکی بر تجربه قبلی و روش‌های سعی و خطا به منظور توسعه دادن سخت افزار مناسب راکتور می‌باشد. امروزه ضروری است که روش‌ها و ابزارهای بهتر به منظور مرتبط کردن سخت افزار راکتور با دینامیک سیالات و پدیده‌های انتقال منتج از آن توسعه داده شود. در این میان ابزار CFD با توجه به قابلیت آن در بیان آنچه که روش‌های پیشین در بیان آن دارای ضعف بوده و توانایی ارائه اطلاعات محلی را به طور دقیق ندارند، همانند اختلاط، می‌تواند به عنوان برترین روش مدلسازی و مطالعه جریان‌های واکنش‌دار مورد مطالعه قرار گیرد. بنابراین می‌توان به کمک روش CFD و قابلیت‌های این روش، مطالعه و شناخت مناسبی از چگونگی تأثیر پارامترهای مختلف در بازدهی واکنش و همچنین توزیع خواص محلی راکتور در شرایط عملیاتی مختلف بدست آورد و عملکرد راکتور را بهینه‌سازی نمود.

۳- شبیه‌سازی جریان‌های مغشوش واکنش‌دار

۳-۱ مدل‌های اغتشاش RANS

مدل‌های اغتشاش RANS دارای بیشترین کاربرد در شبیه‌سازی جریان‌های واکنش‌دار هستند. این دسته از مدل‌ها به علت

1. Reynolds Average Navier Model (RANS)

سهم نوسانات غلظت را می‌توان نادیده گرفت. بنابراین متوسط زمانی جمله تولید واکنش به متوسط زمانی دما و غلظت اجزاء مربوط می‌تواند ارتباط داده شود [۲]:

$$\overline{R_{kn}} = -z_{kn}k_{0n}e^{(-\Delta E_n/RT)} \prod_{i=1}^{l=m} \overline{C_i^{o_{ln}}} \quad (5)$$

برای واکنش‌های سریع و میانی، متوسط زمانی شامل جملات اضافی خواهد شد. این جملات اضافی می‌بایست مدل شوند تا یک مجموعه معادلات بسته برای شبیه‌سازی در اختیار باشد. برای مثال واکنش مرتبه دو بر اساس سرعت لحظه‌ای زیر را در نظر بگیرید:

$$R = k_0e^{(-\Delta E_n/RT)} C_1 C_2 \quad (6)$$

غیرخطی بودن جملات غلظت و فاکتور نمایی که شامل دما می‌باشد باعث می‌شود که بستن جمله واکنش نسبتاً مشکل گردد. حتی برای یک سیستم هم‌دما، متوسط زمانی جمله واکنش شامل یک جمله جدید خواهد شد، متوسط زمانی حاصل ضرب نوسانات غلظت، C' ، جزء ۱ و ۲:

$$R = k_0e^{(-\Delta E_n/RT)} (\overline{C_1 C_2} + \overline{C_1' C_2'}) \quad (7)$$

مدل‌های بسته برای جملاتی مانند جمله دوم درون پرانتز معادله (۷)، $\overline{C_1' C_2'}$ ، نقش بسیار مهمی در مدل‌سازی جریان‌های واکنش‌دار مغشوش به همراه خواهند داشت. لازم به ذکر است هنگامی که شیمی فرایند بسیار پیچیده می‌شود جملاتی مانند جمله فوق در معادلات ظاهر گردیده و شبیه‌سازی فرایند را بسیار پیچیده‌تر می‌کند. روش‌های مختلفی به منظور توسعه این دسته از مدل‌های بسته ارائه شده است. این روش‌ها در دو گروه دسته بندی شده‌اند که عبارتند از مدل‌هایی با حضور تابع توزیع احتمال (PDF) و یا بدون تابع توزیع احتمال و مدل‌های پدیده‌شناسی که در بخش‌های ۶ و ۷ این دسته از روش‌ها مورد بررسی قرار گرفته است.

۳-۲ روش DNS^۲

در حل معادلات حاکم توسط روش DNS تمام معادلات حاکم بدون

در معادله (۱) مشکل‌سازترین جمله مربوط به جمله سرعت واکنش می‌باشد. واکنش‌های شیمیایی غالباً توسط بررسی تمام واکنش‌های اولیه فرموله نمی‌شوند. معمولاً سیستم‌های واکنش‌دار بر اساس مکانیزم توده‌ای فرموله می‌گردند که در نتیجه نیازمند تعداد کمی از اجزاء برای بیان واکنش می‌باشند. هنگامی که جزء m در n واکنش شیمیایی مستقل شرکت می‌کنند به منظور نشان دادن واکنش نیازمند دو ماتریس دوبعدی $m \times n$ استوکیومتری ضرایب و مرتبه واکنش‌ها و دو بردار یک بعدی (n) ضرایب فرکانس k_0 و انرژی اکتیواسیون ΔE می‌باشیم. نرخ خالص تشکیل و مصرف جزء k به علت واکنش n معمولاً به صورت زیر نوشته می‌شود [۲]:

$$R_{kn} = -z_{kn}k_{0n}e^{(-\Delta E_n/RT)} \prod_{i=1}^m C_i^{o_{ln}} \quad (3)$$

که z_{kn} ضریب استوکیومتری مولی برای جزء k در واکنش n ام می‌باشد. R ثابت جهانی گازها و o_{ln} مرتبه واکنش n نسبت به واکنشگر l است. جمله خالص واکنش تولید برای جزء k بر اساس جمع تمامی n واکنش شیمیایی مربوط به این جزء به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$S_k = R_k = \sum_n R_{kn} \quad (4)$$

محاسبه ضرایب و پارامترهای واکنش شیمیایی اجزاء شرکت‌کننده در معادله (۳) نیازمند انجام آزمایش‌های مختلف تحت شرایطی است که خواص فیزیکی فرایند بر آن‌ها تأثیر گذار نباشد. انجام چنین آزمایش‌هایی هنگامی که واکنش سریع باشد بسیار مشکل خواهد بود. در مواردی نیز بدست آوردن ضرایب و سینتیک واکنش نیازمند محاسبات ریاضی پیچیده است. باید خاطر نشان شود که در مدل‌های ارائه شده در بالا فرض شده است که سرعت واکنش شیمیایی که دارای رفتار توابع توانی می‌باشد که البته در مواردی مدل‌های دیگری نیز ارائه شده است [۹ و ۲].

هنگامی که سرعت انجام واکنش شیمیایی نسبت به اختلاط پایین می‌باشد نیازمند به کارگیری مدل‌های اضافی برای بستن جملات تولید واکنش نمی‌باشیم. برای واکنش‌های آرام ($Da \ll 1$) اختلاط مغشوش قبل از به وقوع پیوستن واکنش کامل خواهد شد. بنابراین

1. Probability Distribution Functions
2. Direct Numerical Simulations

خواص ماکروسکوپیک جریان درون راکتور را با دقت خوبی شبیه‌سازی می‌کند. در روش LES طول موج‌های بزرگ تا طول موج‌های موجود در ناحیه اینرسی به طور مستقیم در طی فرایند شبیه‌سازی حل می‌شوند. در این شبیه‌سازی ادی‌های مقیاس کوچک جریان توسط مدل‌های SGS^۲ صورت می‌پذیرد. در مدل‌های SGS سعی می‌شود تا اطلاعات از دست رفته به علت انتخاب SGS همانند نرخ نفوذ مولکولی در مدل‌های استفاده شده گنجانده شود. این روش به هر حال دارای دقت روش DNS نمی‌باشد اما در شبیه‌سازی جریان‌های واکنش دار دارای میزان هزینه محاسباتی بسیار پایین تری است. استفاده از روش DNS در ارائه مدل‌های مناسب SGS برای شبیه‌سازی جریان‌های پیچیده واکنش دار می‌تواند بسیار مناسب باشد. ارائه مدل‌های SGS همچنین می‌تواند بر اساس پدیده‌شناسی رفتار فرایند انجام شود [۲].

همان‌طور که ذکر شد روش LES هزینه عملیاتی بسیار پایین تری نسبت به روش DNS دارد. این مسئله باعث گردیده است که روش LES به طور وسیعی در شبیه‌سازی CFD فرایندهای جریان‌های مورد استفاده قرار گرفته باشد. از جمله تحقیقات انجام شده در این زمینه می‌توان به موارد زیر اشاره نمود:

- شبیه‌سازی جت گازی واکنشی در فلز مذاب توسط داهیکار و همکاران [۳].
- شبیه‌سازی جت راکتورهای تماسی توسط مارچیسو [۱۳] که در تولید ذرات ریز همانند تولید ذرات بسیاری در مقیاس نانو برای کاربردهای دارویی و فرایندهای کریستالیزاسیون دارای اهمیت می‌باشند.

۴- مدل‌های بسته / مدل‌های بر پایه PDF

در واکنش‌هایی که فرایند واکنش نسبت به نرخ اختلاط سریع می‌باشد می‌توان فرض کرد که مواد به سرعت با یکدیگر واکنش می‌دهند. بنابراین هیچ‌گونه عبارتی برای بیان سرعت واکنش ضروری نیست. ساده‌ترین مدل در بیان چنین حالتی مدل شکست ادی EBU می‌باشد [۱۴]. در این مدل نرخ موثر واکنش شیمیایی برابر با کوچک‌ترین نرخ محاسبه شده بر مبنای مدل سینتیکی بر مبنای نرخ شکست ادی گرفته می‌شود. نرخ شکست ادی بر مبنای معکوس مقیاس زمانی مشخصه k/ε محاسبه می‌گردد. بنابراین برای

2. Sub Grid Scale

استفاده از تقریب در نظر گرفته شده و حل می‌شوند. در این روش نیازمند به امکانات محاسباتی قدرتمند می‌باشد. روش DNS عمدتاً در شبیه‌سازی فرایندها با رینولدزهای پایین و هندسه ساده مورد استفاده قرار می‌گیرد. در شبیه‌سازی جریان‌های واکنش دار به علت اینکه تفاوت غلظت باعث اعمال گرادیان‌های شدید در خواص و سایر پارامترهای سیستم می‌گردد و همچنین خواص شدید ناخطی معادلات حاکم همراه با ارتباط قوی میان آن‌ها در این نوع از فرایندها بسیار زیاد و پیچیده می‌باشد، حل معادلات حاکم حتی در رینولدزهای پایین به روش DNS باعث ایجاد چالش‌های زیادی در همگرایی روش‌های عددی و زمان محاسباتی خواهد گردید. مطالعات انجام شده به روش DNS بر روی جریان‌های واکنش دار، برای مثال بینید چاکرabortی و هیل [۱۰]، چندین ویژگی مشخصه این دسته از جریان‌ها را نشان می‌دهند که برخی از آن‌ها عبارتند از [۲]:

- تمایل زیاد به جدایش اولیه، با نواحی واکنشی نسبتاً باریک؛
- نواحی اتلاف کمیت‌های سیستم، مانند E، به خوبی از نواحی واکنشی پیروی می‌کند، ولی غلظت محصولات این رفتار را ندارد؛
- بیشترین نرخ واکنش در نواحی بیشترین نرخ کرنش می‌باشد.
- اضمحلال واریانس کمیت توسط اتلاف مولکولی کنترل می‌شود؛ نه توسط واکنش.

چنین خصوصیتی در فهم برهمکنش میان مغشوش و واکنش‌های شیمیایی و اثر چنین برهمکنش‌هایی بر روی نرخ موثر و گزینش‌پذیری واکنش‌های شیمیایی مهم می‌باشد. روش DNS به طور خاصی در زمینه فرایند احتراق مورد استفاده قرار گرفته است. برخی از تحقیقات انجام شده در زمینه شبیه‌سازی جریان‌های واکنش دار به کمک روش DNS می‌توان به مدل‌سازی دو بعدی موتور احتراقی توسط تپ و همکاران [۱۱] و شبیه‌سازی فرایند احتراق از پیش مخلوط نشده به منظور شناخت بهتر فرایند اختلاط در این فرایند توسط داکروز [۱۲] اشاره نمود.

۳-۳ مدل LES^۱

مدل LES بر خلاف روش DNS از لحاظ حجم محاسبات به علت عدم شبیه‌سازی ادی‌های مقیاس کوچک به طور مستقیم، دارای سرعت محاسباتی بالاتری می‌باشد. این مدل به علت اینکه اثر ادی‌های مقیاس بزرگ سیال را در شبیه‌سازی در نظر می‌گیرد،

1. Large Eddy Simulation

مدل‌ها می‌باشد. این دو مدل بیان‌کننده نحوه میکرو اختلاط در سیستم و تأثیر آن در نحوه توزیع غلظت می‌باشند. مدل‌های غیرتوزیعی که اغلب از مختصات لاگرانژی به منظور توضیح پدیده‌های محلی واقع در توده‌های مجزای سیال استفاده می‌نمایند به طور موفق‌تری در شبیه‌سازی برهمکنش میکرواختلاط و واکنش استفاده گردیده است. به هر حال هیچ کدام از این مدل‌ها نمی‌توانند اثرات چرخش توده سیال، پخش در مقیاس بزرگ و اختلاط محلی را که منجر به توزیع فضایی جدایش می‌شوند محاسبه نمایند. در نتیجه این مدل‌ها نمی‌توانند در شبیه‌سازی کلی و سه بعدی جریان‌های واکنش‌دار مورد استفاده قرار گیرند. بنابراین نیازمند توسعه یک الگوی مناسب می‌باشیم که بتواند فواید و قابلیت‌های روش‌های پدیده‌شناسی را با پتانسیل استفاده از آن‌ها در یک مختصات کلی اولری ترکیب نماید. برخی از تلاش‌های انجام شده در این زمینه عبارتند از:

مدل ESCIMO: این مدل توسط اسپالدینگ [۱۷] ارائه شده است. در این روش اختلاط، واکنش‌های شیمیایی که در دسته‌های همدوس (یکسان) مقیاس کوچک اتفاق می‌افتد مورد بررسی قرار می‌گیرد. این دسته‌ها به وسیله فراگرفتن یک سیال به سیال دیگر که نتیجه چرخیدن ورقه‌های گردابه می‌باشند تشکیل می‌گردد. اولین قسمت دیدگاه ESCIMO شامل حل معادلات اختلاط و واکنش درون این دسته‌های همدوس می‌باشد (biographical part). قسمت دوم (demographic part) شامل تعیین ترکیب جمعیت این دسته‌ها درون راکتور است. با این رهیافت اختلاط، نفوذ مولکولی و واکنش شیمیایی که درون هر دسته اتفاق می‌افتد به طور دقیقی می‌تواند مدل شود. قسمت دوم باعث اعمال مشکلات بسیار به علت نیاز به ارائه جریان واکنش‌دار به صورت سه بعدی خواهد شد. این مسئله باعث محدودیت کاربرد دیدگاه ESCIMO در جریان فرایندهای ساده مانند راکتورهای همزن‌دار می‌شود.

مدل Flamelet: مدل Flamelet به منظور توضیح فرایند احتراق، که یک واکنش شیمیایی سریع می‌باشد، با پدیده اغتشاش ارائه گردیده است. در این مدل فرض می‌شود که احتراق در لایه‌های نازک با ساختار درونی که Flamelet نامیده می‌شوند روی می‌دهد. مهم‌ترین مشخصه این روش در نظر گرفتن واکنش شیمیایی با تمام

واکنش‌های سریع نرخ مصرف و تولید متناسب است با حاصل ضرب چگالی، جزء جرمی و نرخ شکست ادی k/ϵ می‌باشد. این مدل برای پیش‌بینی جریان‌های واکنش‌دار سریع که واکنش دهنده‌ها قبلاً زورود به راکتور کاملاً یا نسبتاً مخلوط شده‌اند مناسب می‌باشد. مدل EBU به هر حال برای واکنش‌های تک مرحله‌ای ارائه شده است و برای استفاده در سیستم‌هایی که دارای واکنش‌های چند مرحله‌ای می‌باشند می‌بایست با احتیاط مورد استفاده قرار گیرد [۲].

دیدگاه استفاده از توابع PDF نیز بر اساس حذف جمله واکنش در معادلات حاکم می‌باشد. در این حالت به کمک تعریف توابع احتمال، توابع PDF، که بیانگر توزیع خواص سیستم به خصوص غلظت می‌باشند می‌توان سینتیک واکنش را در معادلات حاکم حذف نمود. هنگامی که از دیدگاه‌های شبیه‌سازی بر پایه PDF استفاده می‌گردد، تابع احتمال باید براساس اجزای شرکت‌کننده در واکنش تعریف گردد تا بتوان اثر جمله واکنش را در شبیه‌سازی از معادلات حذف نمود. برای واکنش‌های پیچیده در بسیاری از موارد دیدگاهی مانند کمیت بقاء و یا جزء مخلوط می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد که در این حالت یک کمیت بقاء منفرد (جزء مخلوط) به جای معادلات انتقال برای هر یک از اجزاء حل می‌شود. سیستم واکنشی با استفاده از محاسبات تعادل شیمیایی یا با فرض واکنش‌های بسیار سریع مدل می‌گردد. جزء مخلوط برای سیستم‌های از پیش مخلوط نشده واکنشگرها کاربرد دارد و به طور خاصی برای شبیه‌سازی نفوذ مغشوش شعله‌ها، شامل سوخت و اکسیدکننده توسعه یافته است [۲].

۵- مدل‌های پدیده‌شناسی (غیر PDF)

در سال‌های اخیر تعدادی مدل‌های غیر توزیعی و ساده برای شبیه‌سازی اختلاط واکنش‌دار توسعه یافته است. هنگامی که مقیاس زمانی میکرواختلاط بیشتر از مقیاس زمانی واکنش و همچنین مقیاس زمانی ماکرواختلاط کوچک‌تر از مقیاس زمانی فرایند باشد، فرایند توسط میکرواختلاط کنترل می‌شود. چندین مدل میکرواختلاط برای شبیه‌سازی این دسته از جریان‌ها توسعه داده شده است. مدل فراگرفتن E بالدیگا و بورنی [۱۶-۱۵] و مدل برهمکنش به وسیله تبادل با محیط IEM دیوید و ویلمائوکس [۱۶] دو نمونه از تلاش‌های زیاد انجام شده در توسعه این نوع

جزئیات سینتیکی همراه با عدم ضروری به تعریف مقیاس‌های کوچک زمانی و مکانی در محاسبات عددی می‌باشد. در این دیدگاه محاسبات پیچیده شیمیایی از خصوصیات جریان مغشوش با تعریف مفهوم Flamelet همدوس جدا می‌شود. در این روش انتقال چند جزئی و واکنش‌های شیمیایی با دقت بالایی می‌تواند مدل شود. نتایج آنالیز Flamelet محلی می‌تواند در محاسبات کلی میدان جریان مغشوش استفاده شود. سرعت متوسط واکنش برای محاسبه جریان متوسط ضروری است و میدان ترکیب توسط حاصل ضرب سرعت بر مساحت شعله در مساحت شعله بر واحد حجم محاسبه می‌شود. سایر کمیت‌ها براساس حل معادله انتقال مربوط به آن محاسبه می‌گردد. به طور کلی، مدل‌های شعله برای مقادیر بزرگ عدد دام کهلر (واکنش‌های سریع) کاربرد دارد، جایی که مقیاس مغشوش از قطر Flamelet بزرگ‌تر است. بنابراین این مدل برای شبیه‌سازی سیستم احتراقی پیوسته و موتورهای احتراق داخلی مناسب است. این روش برای واکنش‌های سریع فاز مایع به علت قابلیت مدل‌های چند محیطی، مورد استفاده قرار نمی‌گیرد [۲].

مدل‌های چند محیطی: در این رهیافت برخی از مدل‌های میکرو اختلاط برای شبیه‌سازی بر همکنش میان ماکرومیکرو اختلاط با معرفی مفهوم محیط‌های چندگانه بسط یافته‌اند. ریتچی و توگبای [۱۸] مدل سه محیطی، و متا و تاربل [۱۹] مدل چهار محیطی را پیشنهاد کرده‌اند. راناد و برنی [۲۰] مدل فراگرفتن بالدیگا را به مدل چند محیطی بسط دادند. این مدل‌ها دارای پتانسیل بالایی در شبیه‌سازی برهمکنش پیچیده میان جریان‌های واکنش‌دار میان اختلاط واکنشی مقیاس بزرگ و کوچک می‌باشند. در مدل راناد و برنی [۲۰]، جمعیت توده‌های همدوس سیال مقیاس کوچک (دارای اندازه مرتبه مقیاس کولموگرف) به N زیر گروه (یا محیط) تقسیم شده‌است. در این مدل فرض شده است هر توده سیال همدوس دارای غلظت یکنواختی می‌باشد. این مسئله بر این دلالت دارد که نفوذ مولکولی نقش اساسی را در طی فرایند به همراه ندارد (فرض منطقی برای سیستم‌هایی که دارای Sc بزرگتر از ۴۰۰۰ می‌باشند). تغییرات غلظت درون این زیر گروه‌های متفاوت نشان‌دهنده میکرواختلاط غیر کامل و جدایش مقیاس کوچک می‌باشد. این مدل همچنین دو محدودیت مهم دیگر را ارضاء می‌کند: محدودیت واکنش آهسته (اختلاط خالص) و محدودیت واکنش

سریع [۲۰]. این مدل همچنین به طور موفقیت آمیزی برای شبیه‌سازی واکنش‌های سری-موازی در راکتور نیمه پیوسته توسط رانادوبرنی [۲۰] مورد استفاده قرار گرفته است. روش ترکیب مدل‌های چند محیطی با یک چهارچوب دینامیک سیالات محاسباتی توسط فاکس [۲۱] فرموله شده‌است. این رهیافت توافق کامل و مناسب برای شبیه‌سازی واکنش‌های سریع در جریان توربولانس را نشان می‌دهد.

۶- واکنش‌های سریع

بسیاری از فرایندها شامل واکنش در جریان‌های مغشوش می‌باشند. برای واکنش‌های بسیار سریع، سرعت واکنش توسط نرخ اختلاط که به وسیله اغتشاش کنترل می‌گردد، محدود می‌شود. بالدیگا و پوهرسکی [۲۲] به بررسی اثر مستقیم میکرواختلاط بر روی واکنش پرداخته و نشان دادند که این پدیده می‌تواند بر روی تبدیل و گزینش‌پذیری تأثیر گذار باشد [۲۳].

در زمینه شبیه‌سازی جریان‌های واکنش‌دار آزمایش‌ها و مدل‌های متنوعی مورد بررسی قرار گرفته‌است. پوهرسکی و بالدیگا [۲۴] با انجام آزمایش‌های مختلف در راکتور لوله‌ای طول تبدیل برای خنثی‌سازی اسید- پایه را در رینولدزهای مختلف بررسی کردند. هانون و همکاران [۲۵] دو مدل مختلف برای واکنش‌های شیمیایی را مورد بررسی قرار دادند؛ مدل احتراق سرعت محدود و مدل اختلاط چند مقیاسی تابع چگالی احتمال PDF. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی عددی توسط پوهرسکی و بالدیگا [۲۴] با نتایج آزمایشگاهی مقایسه گردید. هانون و همکارانش [۲۵] نشان دادند که مدل احتراق سرعت محدود توانایی پیش‌بینی طول تبدیل را ندارد، و استدلال کردند که علت عدم توانایی این مدل در نادیده گرفتن اثر اختلاط در مقیاس‌هایی است که اثر اتویسکوز- نفوذ مهم می‌باشند. آن‌ها همچنین اشاره کردند که این مدل کوواریانس نوسانات غلظت بر نرخ واکنش را به عنوان یک تابع مستقیم از مقادیر k و ε تعریف می‌نماید. آن‌ها دریافتند که مدل اختلاط چند مقیاسی با یک غلظت لحظه‌ای PDF- β می‌تواند این طول را با دقت منطقی پیش‌بینی نماید. با توجه به مدل‌های ارائه شده در زمینه شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی سریع به بررسی برخی از مدل‌های ارائه شده در این روش خواهیم پرداخت.

۶-۱ مدل EDC

زمانی اتلاف کمیت می‌باشد $(\phi'^2)/\varepsilon_\phi$. اگر از عبارت اتلاف کمیت در معادله (۱) استفاده نماییم، سرعت واکنش متوسط زمانی برای جزء A (EDC-SDT) به صورت زیر ارائه خواهد شد [۲۳]:

$$R_A = -A\rho \frac{\varepsilon}{(\phi'^2)} \min\left(Y_A, \frac{Y_B}{\varepsilon}\right) \quad (9)$$

در مدل استاندارد EDC اتلاف محصول C نیز در نظر گرفته شده‌است، این مسئله به این دلیل است که فرایند احتراق به شدت گرماده است. برای واکنش‌های گرمازا در فاز مایع اتلاف محصول C نباید مورد بررسی قرار گیرد [۲۳].

مقیاس زمانی ذکر شده در بالا برای جریان مغشوش کاملاً توسعه یافته معتبر است. نتایج نشان داده است که توسعه یافتگی در مخلوط‌های مایع به زمان بیشتری نیاز دارد. می‌توان با مدل مخلوط مغشوش مقیاس زمانی چندگانه بالدیگای [۱۵] این نوع فرایند را مورد بررسی قرار داد.

۶-۳ مدل مخلوط توربولانس مقیاس زمانی چندگانه (MTS^۳)

در مخلوط‌های مایع ($Sc \gg 1$)، مقدار محلی واریانس غلظت σ_s^2 بر اساس مقیاس جدایش و مکانیسم‌های مربوط به اختلاط می‌تواند به سه بخش اینرسی-جابجایی، ویسکوز-جابجایی، ویسکوز-نفوذ تقسیم شود [۱۳]:

$$\sigma_s^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 \quad (10)$$

• جابجایی-اینرسی (σ_1^2): واریانس اینرسی-جابجایی از ناهمگنی ماکروسکوپی کسر مخلوط، f ، به عنوان نتیجه نوسانات سرعت تشکیل می‌شود و توسط معادله انتقال زیر تعریف می‌گردد:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\sigma_1^2) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \sigma_1^2) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho(D + D_T)\frac{\partial \sigma_1^2}{\partial x_i}) + 2\rho\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 - \sigma_1^2 R\rho \frac{\varepsilon}{k} \quad (11)$$

که نفوذ توربولانس توسط معادلات زیر بیان می‌گردد:

$$D_T = \frac{\nu_T}{Sc_T}; \quad \nu_T = \frac{\mu_T}{\rho} \quad (12)$$

یکی از روش‌های شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی سریع روش EDC می‌باشد. دیدگاه EDC به منظور پیش‌بینی واکنش احتراقی گازی در جریان‌های مغشوش توسعه یافته است. این روش بر مبنای این فرض استوار است که مقیاس‌های زمانی می‌توانند به اضمحلال ادی‌هایی که حامل مواد واکنش دهنده و محصولات می‌باشند مربوط شوند [۱۴، ۲۶]. دو تفاوت اصلی میان اختلاط واکنش دهنده‌ها در فاز گاز و مایع وجود دارد: اولین تفاوت این است که ضریب نفوذ مولکولی در گازها بسیار بیشتر از مایعات است و این بدان معنی است که عدد اشمیت در فاز گاز بسیار کوچکتر ($Sc \sim 1$) از مقدار آن در فاز مایع می‌باشد ($Sc \gg 1$). دومین دلیل تفاوت نتیجه تغییرات چگالی فاز گاز و حساسیت بالای آن به تغییرات چگالی و فشار می‌باشد [۲۶]. همانطور که اشاره گردید مدل EDC برای واکنش‌های احتراق توسعه یافته است. این نوع واکنش‌ها را اغلب می‌توان به صورت یک واکنش تک مرحله‌ای با سرعت واکنش بی‌نهایت در نظر گرفت [۱۴].

۶-۲ تئوری اتلاف/اختلاط کمیت (SDT)^۲

از آنجایی که مدل EDC به طور خاص برای $Sc \sim 1$ معتبر می‌باشد، یک عبارت جبری برای مقیاس زمانی اتلاف کمیت می‌تواند برای در نظر گرفتن اثر اعداد بزرگ اشمیت، $Sc \gg 1$ ، استفاده شود. فاکس [۲۷] رابطه زیر را برای نرخ اتلاف کمیت ارائه کرده است [۲۳]:

$$\frac{\varepsilon_\phi}{(\phi'^2)} = \frac{2+Sc^{-1}}{2} \left[\frac{1}{2} \frac{k}{\varepsilon} + \frac{1}{2} \ln(Sc) \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \right]^{-1} \quad (8)$$

که ε_ϕ نرخ اتلاف کمیت ϕ و $\langle \phi'^2 \rangle$ واریانس و ν گرانشوری می‌باشد.

مدل EDC برای واکنش‌های بینهایت سریع فرض می‌کند که واکنش توسط میکرواختلاط محدود شده‌است. برای گازها ($Sc \sim 1$) گفته شده‌است که نرخ اختلاط متناسب با نرخ اتلاف انرژی سینتیک مغشوش است. به هر حال برای واکنش در فاز مایع ($Sc \gg 1$) نرخ اختلاط می‌بایست به اتلاف متغیرهای کمیت مرتبط شود. روش دیگر جایگزینی مقیاس زمانی اتلاف دینامیک سیال (k/ε) با مقیاس

1. Eddy Dissipation Concept (EDC)
2. Scalar mixing/Dissipation Theory (SDT)

میکرواختلاط محدود می‌شود ($\rho G \sigma_3^2$) فرم توسعه یافته مدل EDC (EDC-MTS) به صورت زیر بیان خواهد شد:

$$R_A = -\rho G \sigma_3^2 \min\left(Y_A, \frac{Y_B}{s}\right) \quad (18)$$

نتایج مدل استاندارد EDC نشان می‌دهد که این مدل توانایی پیش‌بینی طول ناحیه واکنشی را ندارد. در مدل اصلاح شده اول، مدل EDC-SDT، که مقیاس زمانی اتلاف دینامیک سیال توسط مقیاس زمانی اتلاف کمیت جایگزین شده بود نیز باعث بهبود نتایج نگردید. مدل اصلاح شده EDC-MTS که شامل مقیاس‌های زمانی چندگانه می‌باشد نتایج قابل مقایسه با نتایج آزمایشگاهی را ارائه کرد [۲۳]. اما هیچ‌کدام از مدل‌ها توانایی ارائه اثر افزایش رینولدز را نداشتند، جایی که اثرات ویسکوز-نفوذ بسیار مهم بود و می‌بایست در نظر گرفته شود. این مسئله می‌تواند به خاطر این پدیده باشد که مدل EDC از متوسط زمانی غلظت به جای غلظت لحظه‌ای استفاده می‌کند. در مورد مدل‌های PDF، مدل بتا و کنگره‌ای، باید گفت که این مدل‌ها ناحیه واکنش را بسیار کوتاه پیش‌بینی می‌کنند. مدل β -PDF تنها مدلی است که توانایی پیش‌بینی اثر افزایش عدد رینولدز را دارد؛ این امر احتمالاً به این علت است که این مدل از غلظت لحظه‌ای استفاده می‌کند. کارهای آتی می‌تواند در زمینه اعتبار سنجی مدل‌های EDC-MTS و β -PDF برای هندسه‌ها، شرایط و واکنش‌های دیگر متمرکز شود [۲۳].

۴-۶ روش‌های PDF فرضی^۱

در روش PDF فرضی بر خلاف روش‌های PDF یک تابع احتمال با شکل مخصوص برای متغیر مورد بررسی فرض می‌گردد. این روش در ابتدا به منظور شبیه‌سازی فرایند احتراق در نظر گرفته شده است. برای مثال برای تابع PDF یک احتراق توابع β -PDF، تابع گوسین کوتاه شده^۲ ارائه شده است. اگر چه روش‌های PDF فرضی در برخی از کاربردها مورد توجه می‌باشند، اما در مقایسه با روش‌های PDF دارای دو اشکال است: اول اینکه هیچ‌گونه جمله‌ای در شکل تابع PDF برای دیدن تأثیر واکنش در نظر گرفته نمی‌شود. دوم، روش‌های PDF فرضی از لحاظ محاسباتی برای بسیاری از ترکیبات بسیار گران می‌باشند.

پارامتر R نسبت مقیاس زمانی برای اضمحلال نوسانات سرعت به مقیاس زمانی برای اضمحلال نوسانات غلظت می‌باشد که برابر با ۲ در نظر گرفته شده است.

• ویسکوز-جابجایی (σ_2^2): واریانس ویسکوز-جابجایی توسط معادله زیر محاسبه می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \sigma_2^2) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \sigma_2^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (D + D_T) \frac{\partial \sigma_2^2}{\partial x_i} \right) + \sigma_1^2 R \rho \frac{\varepsilon}{k} - \rho E \sigma_2^2 \quad (13)$$

که پارامتر فراگرفتن E به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$E = 0.058 \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2} \quad (14)$$

کاهش مقیاس جدایش توسط تغییر شکل ویسکوز باعث افزایش اعداد موج و انتقال واریانس به محدوده ویسکوز-نفوذ طیف غلظت، جایی که اختلاط در مقیاس مولکولی بر اثر نفوذ مولکولی و تغییر شکل المان‌ها روی می‌دهد، خواهد شد:

$$G \approx (0.303 + 17050/Sc)E \quad (15)$$

• ویسکوز-نفوذ (σ_3^2): واریانس ویسکوز-نفوذ توسط رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \sigma_3^2) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \sigma_3^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (D + D_T) \frac{\partial \sigma_3^2}{\partial x_i} \right) + \rho E \sigma_2^2 - \rho G \sigma_3^2 \quad (16)$$

واریانس کامل σ_s^2 فرایند با جمع معادله‌های (۱۷)، (۱۹) و (۲۳) به صورت زیر حاصل می‌گردد:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \sigma_s^2) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \sigma_s^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (D + D_T) \frac{\partial \sigma_s^2}{\partial x_i} \right) + 2\rho \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 - \rho G \sigma_s^2 \quad (17)$$

از آنجایی که در واکنش‌های بسیار سریع واکنش به علت

1. Assumed PDF
2. Clipped Gaussian

سیستم‌ها عموماً انتقال جرم میان فازها اولین عامل مهم و اختلاط مغشوش معمولاً در درجه دوم قرار دارد. تنها پیچیدگی اضافی این دسته از فرایندها علاوه بر معادلات حاکم و مدل‌سازی در سیستم‌های چند فاز، امکان برهمکنش میان انتقال جرم و واکنش شیمیایی می‌باشد. انتقال جرم جزء k ام بین فازهای p و q را به صورت زیر می‌توان نشان داد:

$$S_{kpq} = k_{Mpq} a_{pq} \eta_{pq} (\Delta C_{kpq}) \quad (۱۹)$$

که k_{Mpq} ضریب انتقال جرم، a_{pq} مساحت سطح بر واحد حجم، η_{pq} ضریب تشدید و بیانگر برهمکنش انتقال جرم و واکنش‌های شیمیایی و ΔC_{kpq} نیروی محرکه انتقال جرم بین فاز p و q بر اساس غلظت می‌باشد. برای واکنش‌های آهسته (نسبت به نرخ انتقال جرم) ضریب تشدید برابر با یک و برای واکنش‌های سریع تابعی از سینتیک واکنش و غلظت خواهد بود.

۷-۱ دیدگاه VOF

مدل‌های با مبنای VOF با محاسبه سطح مشترک می‌توانند جریان‌های مقیاس کوچک در نزدیکی سطح مشترک بین فازها را شبیه‌سازی نمایند. بنابراین این دسته از مدل‌ها اجازه فهم برهمکنش میان انتقال جرم و فرایند جریانی اطراف سطح مشترک را ارائه می‌نمایند. باید خاطر نشان کرد که توافق کمی میان پیش‌بینی دیدگاه VOF و داده‌های آزمایشگاهی برای بیشتر موارد مربوط به مهندسی راکتور، رضایت بخش نمی‌باشد. بنابراین اگرچه این روش ابزار یادگیری مفیدی برای فهم میدان جریان در اطراف فاز دوم و شکل آن فاز خواهد بود، ولی کاربرد روش VOF در شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی واقعی مگر ابتدا با بدست آوردن پیش‌بینی دقیق میدان جریان و شکل سطح مشترک، ممکن نمی‌باشد. برخی از تحقیقات انجام شده در زمینه شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی بر اساس دیدگاه VOF عبارتند از:

- شبیه‌سازی راکتور پر شده گاز مایع برای تصفیه آلودگی آب توسط لوپز و فریرا [۲۹].
- شبیه‌سازی نحوه تر شدن ذرات کاتالیست درون یک راکتور و محاسبه بازده تبدیل کاتالیست برای واکنش درجه اول [۳۰].

روش‌های PDF فرضی برای واکنش‌ها، تابع چگالی احتمال توزیع غلظت کمیت می‌باشند. غلظت می‌تواند بر اساس جزء مخلوط f بیان شود [۱۵]. معادلات انتقال برای متوسط زمانی مربع نوسانات غلظت حل می‌شوند و از مقادیر محاسبه شده آن کمیت و فرضیات مربوط به شکل غلظت لحظه‌ای (پروفایل زمانی)، یک توزیع فرضی غلظت لحظه‌ای با زمان بدست خواهد آمد [۲۸].

۷-۲ فرایندهای جریانی چند فاز و واکنش‌دار

فرایندهای چند فاز نقش بسیار مهمی در فرایندهای شیمیایی و تولید محصولات بر عهده دارند. این نوع از فرایندهای شیمیایی دسته وسیعی از فرایندها با مقیاس‌های بزرگ مانند راکتورها شکست کاتالیستی و یا راکتورهای کوچک مخصوص تولید یک ماده شیمیایی با ارزش را شامل می‌شوند. در این میان حضور بیش از یک فاز باعث ایجاد سوالاتی برای یک مهندس راکتور خواهد شد. فرایندهای چند فاز بر اساس شرایط عملیاتی و هندسه سیستم نشان‌دهنده رژیم‌های مختلفی از نحوه توزیع فازها می‌باشند. در این دسته از فرایندها دینامیک سیال و فرایندهای انتقال که درون راکتور صورت می‌پذیرند وابستگی شدیدی به ساختار راکتور و شرایط عملیاتی دارند. در این حالت حتی دستگاه‌ها و اجزاء کوچک همانند طرح نازل خوراک یا توزیع کننده می‌توانند اثرات چشمگیری در فرایند به همراه داشته باشند. بنابراین اهمیت و کیفیت مدل‌های استفاده شده در شبیه‌سازی این دسته از جریان‌ها تأثیر بسیار زیادی در نتایج شبیه‌سازی به همراه خواهند داشت.

به طور کلی، فرایندهای جریانی واکنش‌دار چندفازی بر اساس مکان ناحیه واکنش به سه دسته عمده تقسیم می‌شوند [۲]:

- ۱- واکنش‌هایی که درون یکی از فازها به وقوع می‌پیوندد (درون فاز و یا نزدیک سطح مشترک).
- ۲- واکنش‌هایی که در سطح مشترک یکی از فازهای شرکت کننده به وقوع می‌پیوندد (واکنش‌های کاتالیستی).
- ۳- واکنش‌هایی که در یک فاز روی می‌دهند ولی محصولات فاز نامحلول دیگری را تشکیل می‌دهند (مانند فرایند کریستالیزاسیون).

برای جریان‌های چند فاز حالت ۱ و ۲ حداقل یکی از واکنشگرها از فاز دیگر می‌بایست خود را به محل واکنش برساند. در این

جریان‌های واکنشی در دیدگاه اولری- اولری به موارد زیر می‌توان اشاره نمود:

- شبیه‌سازی برج حبایی دوغابی سنتز فیشر تروپش [۳۴].
 - شبیه‌سازی هیدرودینامیک و سینتیک واکنش راکتور بستر سیال FCC [۳۵].
 - مدل‌سازی رسوب CaCO_3 درون برج حبایی گاز- مایع [۳۶].
- برهمکنش میان اختلاط مغشوش و واکنش شیمیایی فقط مربوط به فرایندهای نوع (۳) - واکنش‌هایی که در یک فاز روی می‌دهند ولی محصولات فاز نامحلول دیگری را تشکیل می‌دهند - مربوط می‌شوند. در این دسته از فرایندها واکنش فقط در یک فاز روی می‌دهد. بنابراین، اگر واکنش‌ها نسبت به اختلاط سریع باشند، اختلاط مغشوش می‌تواند در سرعت واکنش مؤثر باشد. اختلاط مغشوش به علت اینکه تعیین کننده نحوه توزیع غلظت اجزاء در محیط می‌باشد و از طرفی انجام واکنش بر اساس مدل سینتیکی واکنش تابعیت غلظت دارد، در واکنش‌های سریع سرعت فرایند اختلاط تأثیر زیادی در سرعت انجام واکنش به همراه دارد. این دسته از سیستم‌ها به علت تشکیل محصولاتی که به صورت ترمودینامیکی تمایل به تشکیل فاز دیگری را دارند، بسیار پیچیده خواهند بود. برای مثال در کریستالایزر واکنشی، واکنش همگن در فاز مایع محصولاتی را تشکیل می‌دهند که تمایل به ته‌نشینی دارند. در این مورد دو رهیافت ممکن می‌باشد. در مورد اول، رهیافت ساده‌تر، جملات انتقال جرم بین فازی بر اساس معادله (۱) بدون هیچگونه عملیات خاصی مدل می‌شوند [۲]. در رهیافت دوم فرایند هسته‌زایی توسط برخی از مدل‌های تجربی ارائه می‌شود. بر اساس اهداف مورد بررسی مدل جریان، مهندس راکتور می‌تواند یک مدل مناسب با استفاده از روش‌های پایه‌ای ارائه شده در این بخش و سایر بخش‌ها شبیه‌سازی نماید.

۸- جمع‌بندی

تحقیقات انجام شده در زمینه شبیه‌سازی فرایندهای واکنش‌دار نشان می‌دهد آنچه که در شبیه‌سازی این دسته از فرایندها به طور خاص مورد توجه محققین می‌باشد توانایی مدل‌های ارائه شده در کیفیت پیش‌بینی و مدل‌سازی اثراتی همانند انتقال جرم و واکنش می‌باشد. نتایج تحقیقات بیانگر این مطلب است که قابلیت روش‌های ارائه شده در شبیه‌سازی اثرات و پدیده‌های سیالاتی درون یک

شبیه‌سازی راکتور ناپیوسته همزن‌دار همراه با دو واکنش موازی و سریع بر اساس استفاده از دو مدل میکرو اختلاط برای بیان اثرات میکرو اختلاط و اغتشاش [۳۱].

۷-۲ رهیافت اولری - لاگرانژی

در رهیافت اولری- لاگرانژی پدیده‌های سطح- ذرات با دقت بسیار بالایی بر اساس توسعه معادلات بقاء اجزا برای هر جزء منفرد می‌تواند مدل شود. جملات تولید در چنین معادلاتی بقاء ذرات دارای شکل معادله (۱) می‌باشند. کشش سطحی در این جملات تولید بر اساس قطر موثر ذرات فاز پراکنده محاسبه می‌شود [۲]. به منظور شبیه‌سازی انتقال جرم درون فازی و سیستم‌های واکنشی، بررسی ارتباط دو طرفه میان فاز پیوسته و پراکنده لازم است. جملات تولید (ارائه‌کننده انتقال جرم و حرارت) محاسبه شده از مسیر ذرات نیازمند در نظر گرفته شدن در معادلات حاکم فاز پیوسته می‌باشند. اگر وابستگی میان انتقال جرم و واکنش شیمیایی وجود دارد، همان‌طور که در بالا بحث شد، نیازمند بررسی یک مدل محلی مناسب هنگام محاسبه جملات تولید خالص به علت انتقال جرم می‌باشیم. برای جریان‌های مغشوش چند فازی واکنش‌دار، تعدادی مسیر تصادفی برای محاسبه کردن یک جمله تولید جدید برای معادلات فاز پیوسته می‌بایست استفاده شود. یک نیروی محرک لحظه‌ای برای غلظت (با دما) تابعی از غلظت لحظه‌ای (یا دما) فاز پیوسته خواهد بود. برخی از تحقیقات انجام شده در شبیه‌سازی CFD به کمک این دیدگاه عبارتند از:

- شبیه‌سازی راکتور UV^۱ برای دو هندسه مختلف راکتور (U و L شکل) به منظور بدست آوردن سرعت واکنش متأثر از پروفایل جریان در راکتورها [۳۲].
- شبیه‌سازی CFD فرایند کلردار شدن متان [۳۳].

۷-۳ رهیافت اولری - اولری

در شبیه‌سازی‌های اولرین- اولرین یک جمله تولید واکنش موثر به شکل معادله (۱) می‌تواند در معادلات بقاء اجزاء برای تمام اجزاء شرکت کننده استفاده شود. همچنین توضیحات بالا که مربوط به مدل‌هایی برای ضرایب تشدید محلی می‌شوند در رهیافت اولری- اولری دارای کاربرد هستند [۲]. در زمینه شبیه‌سازی

1. Ultraviolet

- [8] Ekambara, K., Dhotre, M. T., Joshi, J. B., "CFD simulation of homogeneous reactions in turbulent pipe flows - Tubular non-catalytic reactors", Chem. Eng. J., 23-29: 117, (2006).
- [9] Froment Gi, F., De Wield, J., Bischoff, K. B., "Chemical Reactor Analysis and Design", John Wiley & Sons, 3rd Ed., New York (2011).
- [10] Chakrabarti, M., Hill, J. C., "First order closure theories for series-parallel reaction in simulated homogeneous turbulence", AIChE J., 43: 902-912 (1997).
- [11] Tap, F. A., Hilbert, R., Thevenin, D., Veynante, D., "A generalized flame surface density modelling approach for the auto-ignition of a turbulent non-premixed system", Combust. Theor. Model., 8: 165-193 (2004).
- [12] Da Cruz, A. P., Baritaud, T. A., Poinso, T. J., "Self-ignition and combustion modeling of initially nonpremixed turbulent systems", Combust. Flame, 124: 65-81 (2001).
- [13] Marchisio, D. L., "Large Eddy Simulation of mixing and reaction in a Confined Impinging jets Reactor", Comput. Chem. Eng., 33: 408-420 (2009).
- [14] Magnussen, B. F., Hjertager, B. H., "On mathematical modelling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion", 16th International Symposium on Combustion, (1976).
- [15] Baldyga, J., Bourne, J. R., "Simplification of micromixing calculations. I. Derivation and application of new model", Chem. Eng. J., 42: 83-92 (1989).
- [16] David, R., Villermaux, J., "Micromixing effects on complex reactions in a CSTR", Chem. Eng. Sci., 30: 1309 (1987).
- [17] Spalding, D. B., "General theory of turbulent combustion", J. Energy, Vol. 2: 16 (1978).
- [18] Ritchie, B. W., Togby, A. H., "A three environment micromixing model for chemical reactors with arbitrary separate feed streams", Chem. Eng. J., 17: 173 (1979).
- [19] Mehta, R. V., Tarbell, J. M., "Four environment models of mixing and chemical reaction" AIChE J., 29: 30 (1983).
- [20] Ranade, V. V., Bourne, J. R., "Fluid mechanics and blending in agitated tanks", Chem. Eng. Sci., 46: 1881 (1991).
- [21] Fox, R. O., "On the relationship between Lagrangian micromixing models and computational fluid dynamics", Chem. Eng. Process, 37: 521-535 (1998).
- [22] Baldyga, J., Pohorecki, R., "Turbulent micromixing in chemical reactors-a review", Chem. Eng. J., 58: 183 (1995).
- [23] Hjertager, L. K., Hjertager, B. H., Solberg, T., "CFD modelling of fast chemical reactions in turbulent liquid flows", Comput. Chem. Eng., 26: 507-515 (2002).
- [24] Pohorecki, R., Baldyga, J., "New model of micromixing in chemical reactors. 1. General development and application to a tubular reactor", Ind. Eng. Chem. Fund. 22: 392 (1983).
- [25] Hannon, H., Hearn, S., Marshall, L., Zhou, W., "Assessment of CFD approaches to predicting fast chemical reactions", Presented at the 1998 Annual Meeting, Miami (1998).
- فرایند نمی‌تواند به طور دقیق همان کیفیت و دقت را در شبیه‌سازی اثرات مربوط به پدیده‌های منتج از واکنش شیمیایی، انتقال جرم و غیره که درون سیستم به وقوع می‌پیوندد به همراه داشته باشد. در این میان مدل‌هایی که توانایی شبیه‌سازی میدان جریان را به طور دقیق‌تری دارند، همانند مدل DNS، LES و رهیافت VOF در شبیه‌سازی جریان‌های چند فاز، قابلیت بالاتری در کیفیت شبیه‌سازی ارائه می‌نمایند.
- مهمترین مسئله‌ای که می‌بایست در شبیه‌سازی فرایندهای جریان واکنش دار به آن توجه نمود، مسئله مستقل بودن سرعت واکنش از فیزیک جریان می‌باشد. سرعت سینتیک یک واکنش شیمیایی یک خاصیت ذاتی واکنش است و تابعیتی از فرایندهایی مانند اختلاط و انتقال جرم یا حرارت ندارد. بنابراین باید سعی شود که سینتیک استفاده شده در شبیه‌سازی چنین خاصیتی را به همراه داشته باشد. اما با توجه به این که محاسبه جمله واکنش به طور مستقل از پدیده‌های سیالاتی مسئله بسیار دشواری می‌باشد، در نظر گرفتن پارامترهایی که در شبیه‌سازی میدان جریان مورد استفاده قرار می‌گیرد، همانند بیان رابطه سینتیک واکنش به عنوان تابعی از k و ε در واکنش‌های سریع همراه با تابعیتی از غلظت اجزاء، می‌تواند در بهبود نتایج شبیه‌سازی بسیار مؤثر باشد.

مراجع

- [1] Levenspiel, O., "Chemical Reaction Engineering", 2nd ed., John Wiley & Sons Inc. (1972).
- [2] Ranade, V. V., "Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering", Academic press, (2002).
- [3] Smith, J. M., Van Ness, H. S. "An Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics" New York, McGraw Hill, (1959).
- [4] Sandler, S. I., "Chemical and Engineering Thermodynamics" New York, John Wiley & Sons, (1998).
- [5] Smith, J. M., "Chemical Engineering Kinetics" New York, McGraw Hill, (1970).
- [6] Dahikar S.K., Joshi J.B., Shah, M.S., Kalsi, A.S., RamaPrasad, C.S., Shukla, D.S. "Experimental and computational fluid dynamic study of reacting gas jet in liquid: Flow pattern and heat transfer", Chem. Eng. Sci. 65: 827 (2010).
- [7] Lan, X. Y., Xu, C. M., Wang, G., Wu, L., Gao, J. S., "CFD modeling of gas-solid flow and cracking reaction in two-stage riser FCC reactors", Chem. Eng. Sci., 64: 3847-3858, (2009).

- [26] Baldyga, J., Bourne, J. R., "Turbulent mixing and chemical reactions", John Wiley & Sons, New York, (1999).
- [27] Fox, R. O., "Computational methods for turbulent reacting flows in the chemical process industry", *Revue de l'Institutfrançais du petrole*, 51: 215 (1996).
- [28] Serag-El-Din, M. A. S., "The numerical prediction of the flow and combustion processes in a three-dimensional can combustor", Ph.D. thesis, University of London, (1977).
- [29] Lopes, R. J. G., Quinta-Ferreira, R. M., "Evaluation of multiphase CFD models in gas-liquid packed-bed reactors for water pollution abatement", *Chem. Eng. Sci.*, 65: 291-297 (2010).
- [30] Augier, F., Koudil, A., Royon-Lebeaud, A., Muszynski, L., Yanouri, Q., "Numerical approach to predict wetting and catalyst efficiencies inside trickle bed reactors", *Chem. Eng. Sci.*, 65: 255-260 (2010).
- [31] Akiti, O., Armenante, P. M., "Experimentally-validated micromixing-based CFD model for fed-batch stirred-tank reactors", *AIChE J.*, 50: 566-577 (2004).
- [32] Sozzi, D. A., Taghipour, F., "UV reactor performance modeling by Eulerian and Lagrangian methods", *Environ. Sci. Technol.*, 40: 1609-1615 (2006).
- [33] Raman, V., Fox, R. O., Harvey, A. D., West, D. H., "CFD analysis of premixed methane chlorination reactors with detailed chemistry", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40: 5170-5176, (2001).
- [34] Troshko, A. A., Zdravistch, F., (2009) "CFD modeling of slurry bubble column reactors for Fisher-Tropsch synthesis", *Chem. Eng. Sci.*, 64: 892-903, (2001).
- [35] Zimmermann, S., Taghipour, F., "CFD modeling of the hydrodynamics and reaction kinetics of FCC fluidized-bed reactors", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 9818-9827(2005).
- [36] Rigopoulos, S., Jones, A., "Modeling of semibatch agglomerative gas-liquid precipitation of CaCO₃ in a bubble column reactor", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 42: 6567-6575(2003).