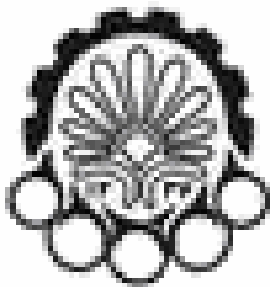


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی امیرکبیر
(پلی تکنیک تهران)

دانشکده مهندسی شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی گرایش پیشرفته

مدل سازی فرآیندهای کریستالیزاسیون به کمک دینامیک سیالات
محاسباتی

نگارش:

علیرضا حسینی

استاد راهنما:

دکتر منصور کلباسی

شهریور ۱۳۸۶

چکیده

هدف از این تحقیق، تهیه یک مدل موازنه جمعیت دینامیک سیالات محاسباتی به منظور بررسی توزیع اندازه ذرات در فرآیند های مختلف کریستالیزاسیون بود. در این راه، اولین مرحله بررسی توان محاسباتی نرم افزار دینامیک سیالاتی منتخب **Fluent** در پیشبینی میدان سرعت و سرعت پراکنش انرژی با انتخاب مدل **k-ε** به عنوان مدل متلاطم بود. بررسی کیفی متون علمی نشان داد که نرم افزار مذکور از قابلیت های خوبی در این خصوص برخوردار است. در مرحله بعد صحت پیشبینی های مدل دینامیک سیالاتی یک مخزن همزن دار خاص، در خصوص توزیع زمان اقامت، در مقایسه با نتایج تجربی مورد بررسی قرار گرفت. از لحاظ کمی نتایج بدست آمده از مدل دینامیک سیالاتی با نتایج تجربی تطابق خوبی نشان میدهد. با انجام دو مرحله فوق، مدل دینامیک سیالاتی تهیه شده بستری کارآمد و مفید برای تلفیق با مدل موازنه جمعیت تشخیص داده شد.

در مرحله بعد مدل موازنه جمعیت در شرایط ناپیوسته ارزیابی شد. در این مرحله هیچگونه محاسبات دینامیک سیالاتی لحاظ نشده و صرفاً مدلسازی موازنه جمعیت صورت گرفت. بررسی مدل موازنه جمعیت در یک مخزن همزن دار پیوسته دو بعدی با هندسه ای ساده، در مرحله بعد انجام شد. در دو مرحله اخیر، مقایسه نتایج بدست آمده از مدل موازنه جمعیت تهیه شده با نتایج حل موازنه جمعیت به روشهای تحلیلی، در بسیاری از موارد تطابق بسیار خوبی نشان داد. در نهایت به منظور ارزیابی مدل موازنه جمعیت در یک مخزن همزن دار سه بعدی پیوسته، مدل دینامیک سیالاتی میدان جریان و مدل موازنه جمعیت در محیط دینامیک سیالاتی با هم تلفیق شده و نتایج آن با نتایج حل به روشهای تحلیلی مقایسه گردید. خطای محاسبات در این مرحله عموماً از مرحله قبل بیشتر است زیرا که چرخش سیال درون مخزن با شرایط اختلاط ایده آل تطابق کامل ندارد.

با استناد به این پژوهش می توان گفت که مدل دینامیک سیالات محاسباتی تهیه شده، مدل خوبی برای محاسبه عملکرد کریستالیزورها است. علاوه بر این، هنگامی که پارامترهای سینتیکی هسته سازی، رشد، به هم پیوستگی و شکست کاملاً مشخص باشند، مدل مذکور مدل قابل اعتمادی است.

کلمات کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی، موازنه جمعیت، توزیع اندازه ذرات، توزیع زمان اقامت،

هسته سازی، رشد، به هم پیوستگی و شکست

فهرست علائم

علائم لاتین

B	تابع تولد ذره
B_0	سرعت هسته سازی
C_{in}	غلظت ورودی حلال
C_{out}	غلظت خروجی حلال
C_{μ}	ثابت مدلسازی متلاطم
$C_{\varepsilon 1}$	ثابت مدل سازی متلاطم
$C_{\varepsilon 2}$	ثابت مدل سازی متلاطم
D	تابع مرگ ذره
G	سرعت رشد
j_{α}	دبی جرمی جزء α
K	انرژی متلاطم
$m = \rho_s \beta_v x^3$	جرم ذرات
n, n_k	دانشیته جمعیت ذره
n_0	دانشیته تعداد هسته
n_{in}	دانشیته جمعیت در ورودی
n_{out}	دانشیته جمعیت در خروجی
P	فشار

q_0	تابع توزیع دانسیته تعداد نرمال
Q_k	دبی حجمی ورودی یا خروجی از حجم کنترل ماکروسکوپی
Q_{in}	دبی ورودی
Q_{out}	دبی خروجی
r_α	سرعت واکنش جزء α
t	زمان
\bar{U}	سرعت متوسط
V	حجم مخزن کریستالیزور
v_{rel}	سرعت نسبی بین ذرات و هدف که میتواند همزن، بافل، دیواره و دیگر ذرات باشد
W_p	انرژی برخورد
x	اندازه ذرات

علائم یونانی

a	فاکتور شکلی جزء ، برای مکعب برابر ۱ است
ω_α	جزء جرمی کامپوننت α
ρ	دانسیته مایع
ρ_s	دانسته ذرات جامد
η	ویسکوزیته دینامیک
ε	پراکندگی
δ_k	ثابت مدل سازی متلاطم

δ_ε

ثابت مدلسازی متلاطم

β_v

ضریب حجمی

$\tau = VQ$

زمان اقامت

$\Phi()$

تابع مرحله‌های هوی ساید

فهرست مطالب

شماره صفحه	عنوان
۲	فصل اول: مقدمه
	فصل دوم: اصول اولیه
۵	۱-۲ مقدمه
۵	۲-۲ مدل سازی ماکروسکپی
۲۳	۳-۲ مدل سازی دیفرانسیلی
۲۷	۴-۲ روش مدل سازی موازنه جمعیت
۳۴	۵-۲ اثبات اعتبار، ارزیابی و چالش پیش بینی
۳۶	۶-۲ خلاصه
	فصل سوم: مقایسه میدان سرعت
۳۸	۱-۳ مقدمه
۳۸	۲-۳ مقایسه توزیع میدان سرعت
۴۱	۳-۳ مقایسه توزیع سرعت پراکندگی انرژی
۴۲	۴-۳ خلاصه
	فصل چهارم: توزیع زمان اقامت در مخزن همزن دار - مقایسه پیش بینی های دینامیک سیالات محاسباتی با نتایج تجربی
۴۴	۱-۴ مقدمه
۴۴	۲-۴ آزمایش های تجربی
۵۵	۳-۴ مدل دینامیک سیالات محاسباتی مخزن
	۴-۴ نتیجه گیری
۶۰	

فصل پنجم: ارزیابی حل مدل موازنه جمعیت به روش های SMOM و QMOM
برای استفاده در مدل سازی دینامیک سیالات محاسباتی به کمک
روشهای حل تحلیلی در فرآیندهای ناپیوسته

۶۲	۱-۵ مقدمه
۶۲	۲-۵ معادله موازنه جمعیت ناپیوسته
۶۷	۳-۵ مطالعات موردی
۸۶	۴-۵ بحث و نتیجه گیری

فصل ششم: مقایسه روش QMOM با روشهای تحلیلی برای حل معادله موازنه
جمعیت در یک کریستالیزور CMSMPR دو بعدی

۸۸	۱-۶ مقدمه
۹۱	۲-۶ ساختار دو بعدی مخزن هم زن دار در مدل دینامیک سیالات محاسباتی
۹۵	۳-۶ مطالعات موردی
۱۰۴	۴-۶ بحث و نتیجه گیری

فصل هفتم: مقایسه روش QMOM با روشهای تحلیلی برای حل معادله موازنه
جمعیت در یک کریستالیزور CMSMPR سه بعدی

۱۰۷	۱-۷ مقدمه
۱۰۷	۲-۷ ساختار سه بعدی مخزن همزن دار در مدل دینامیک سیالات محاسباتی
۱۱۱	۳-۷ مطالعات موردی
۱۲۷	۴-۷ بحث و نتیجه گیری

فصل هشتم: نتیجه گیری و پیشنهاداتی برای مطالعات آتی

۱۲۹	۱-۸ مقدمه
۱۳۰	۲-۸ مقایسه میدان سرعت
۱۳۰	۳-۸ مقایسه توزیع زمان اقامت
۱۳۱	۴-۸ ارزیابی مدل موازنه جمعیت در کریستالیزور ناپیوسته
	۵-۸ ارزیابی مدل دینامیک سیالات محاسباتی موازنه جمعیت در کریستالیزور

۱۳۱	همزن دار پیوسته دو بعدی
	۶-۸ ارزیابی مدل دینامیک سیالات محاسباتی موازنه جمعیت در کریستالیزور
۱۳۲	همزن دار پیوسته سه بعدی
۱۳۲	۷-۸ پیشنهادات
۱۳۲	۸-۸ مطالعات آتی
۱۳۳	مراجع
	ضمائم
۱۳۸	ضمیمه الف: الگوریتم SMOM و QMOM
۱۴۶	ضمیمه ب: تبدیل ممان حجمی به طولی
۱۴۷	ضمیمه ج: کد برنامه

فهرست شکلها

- ۱-۲ کریستالیزور همزن دار پیوسته
- ۲-۲ نمودار دانسیته جمعیت برای کریستالیزور MSMMPR
- ۳-۲ نمودار دانسیته جمعیت کریستالیزور MSMMPR بر حسب حجم ذرات
- ۴-۲ الف پیش بینی های تابع دانسیته تعداد در حالتی که سرعت به هم پیوستگی برابر با ۰/۱، ۰/۰۱، ۰/۰۰۱ باشد
- ۴-۲ ب پیش بینی های تابع دانسیته تعداد در حالتی که سرعت رشد برابر با ۰/۱، ۰/۰۱، ۰/۰۰۱ باشد
- ۴-۲ ج پیش بینی های تابع دانسیته تعداد در حالتی که سرعت و هسته زایی برابر با ۱، ۰/۱ باشد
- ۵-۲ پیش بینی تابع دانسیته تعداد در حالتی که فقط پدیده شکست وجود داشته باشد
- ۶-۲ فازهای مدل سازی و شبیه سازی و نقش ارزیابی و اثبات اعتبار
- ۱-۳ نمودارهای بدست آمده از Fluent برای توزیع جریان (سمت چپ قسمت بالا و سمت راست قسمت پائین)
- ۲-۳ توزیع سرعت در یک کریستالیزور همزن دار (داده های تجربی)
- ۳-۳ سرعت پراکندگی انرژی بدست آمده از Fluent (دور همزن : ۴۰۰ دور در دقیقه)
- ۴-۳ نتایج تجربی سرعت پراکندگی انرژی $\bar{\epsilon}$
- ۱-۴ هندسه مخزن
- ۲-۴ پروفایل غلظت اندازه گیری شده بوسیله ضریب هدایت حرارتی، غلظت یون هیدروژن و دما در شرایط دبی ۱۱۰ میلی لیتر در دقیقه و سرعت همزن صفر دور در دقیقه در مخزن بدون بافل
- ۳-۴ پروفایل غلظت اندازه گیری شده بوسیله ضریب هدایت حرارتی، غلظت یون هیدروژن و دما در شرایط دبی ۱۱۰ میلی لیتر در دقیقه و سرعت همزن ۲۸۷ دور در دقیقه در مخزن بدون بافل
- ۴-۴ توزیع زمان اقامت اندازه گیری شده بر مبنای غلظت H+ در شرایط دبی ۱۱۰ میلی لیتر در دقیقه و سرعت همزن ۲۸۷ دور در دقیقه در مخزن بدون بافل

- ۵-۴ زمان اقامت متوسط بر حسب سرعت همزن در دبی های مختلف برای راکتور آزمایشگاهی ۱/۴ لیتری بدون بافل
- ۶-۴ مقایسه $sltm$ در دبی ها و سرعت های مختلف همزن در راکتور ۱/۴ لیتری بدون بافل
- ۷-۴ زمان اقامت متوسط، رسم شده در مقابل سرعت همزن در راکتور آزمایشگاهی بافل دار ۱/۴ لیتری
- ۸-۴ انحراف استاندارد توزیع زمان اقامت، رسم شده در مقابل سرعت همزن برای راکتور آزمایشگاهی بافل دار ۱/۴ لیتری
- ۹-۴ پروفایل بردار سرعت برای جریان متلاطم در راکتور مدل شده (مشابه راکتور آزمایشگاهی) با حجم ۱/۴ لیتر، در شرایطی که دبی خوراک ۴۰ میلی لیتر در دقیقه و سرعت همزن ۸۰ دور در دقیقه باشد
- ۱۰-۴ غلظت خروجی به صورت تابعی از زمان برای پیش بینی توزیع زمان اقامت در سرعت های مختلف همزن و دبی خوراک ۴۰ میلی لیتر در دقیقه
- ۱۱-۴ مقایسه نتایج شبیه سازی، آزمایش های تجربی و راکتور اختلاط کامل ایده آل در خصوص تابع توزیع زمان اقامت $E(t)$ در شرایط سرعت همزن صفر دور در دقیقه و دبی خوراک ۴۰ میلی لیتر در دقیقه
- ۱۲-۴ سرعت همزن ۲۰ دور در دقیقه و دبی خوراک ۴۰ میلی لیتر در دقیقه
- ۱۳-۴ سرعت همزن ۲۰۰ دور در دقیقه و دبی خوراک ۴۰ میلی لیتر در دقیقه
- ۱-۵ مقایسه مقادیر ممان صفرم محاسبه شده به روش تحلیلی (معادله ۵-۱۴) و روش های SMOM و QMOM استفاده شده در کد دینامیک سیالات محاسباتی مطالعه موردی ۱: هسته سازی
- ۵-۲-الف نمودار ممان صفرام در برابر زمان برای روش های حل تحلیلی، SMOM و QMOM برای مطالعه موردی ۲
- ۵-۲-ب نمودار ممان اول در برابر زمان برای روش های حل تحلیلی، SMOM و QMOM برای مطالعه موردی ۲
- ۵-۲-پ نمودار ممان دوم در برابر زمان برای روش های حل تحلیلی، SMOM و QMOM برای مطالعه موردی ۲
- ۵-۲-ت نمودار ممان سوم در برابر زمان برای روش های حل تحلیلی، SMOM و QMOM برای مطالعه موردی ۲

- ۲-۵- ث نمودار ممان چهارم در برابر زمان برای روش های حل تحلیلی، SMOM و QMOM برای مطالعه موردی ۲
- ۲-۵- ج نمودار ممان پنجم در برابر زمان برای روش های حل تحلیلی، SMOM و QMOM برای مطالعه موردی
- ۳-۵- الف نمودار ممان صفرام در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۳
- ۳-۵- ب نمودار ممان اول در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۳
- ۳-۵- پ نمودار ممان دوم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۳
- ۳-۵- ت نمودار ممان سوم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۳
- ۳-۵- ث نمودار ممان چهارم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۳
- ۳-۵- ج نمودار ممان پنجم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۳
- ۴-۵ نمودار توزیع جرم فزآینده در مقابل اندازه، X ، در شرایط $k_0=1 \text{ hr}^{-1}$ ، $\kappa=\lambda=6$ ، شکست دو تایی، $x_m=1 \mu m$
- ۵-۵- الف نمودار ممان صفرام در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۴
- ۵-۵- ب نمودار ممان اول در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۴
- ۵-۵- پ نمودار ممان دوم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۴
- ۵-۵- ت نمودار ممان سوم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۴
- ۵-۵- ث نمودار ممان چهارم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای مطالعه موردی ۴

۵-۵-ج نمودار ممان پنجم در برابر زمان- مقایسه روش حل تحلیلی و QMOM برای

مطالعه موردی ۴

- ۱-۶ شبکه شبیه سازی دو بعدی مخزن همزن دار اختلاط کامل
- ۲-۶ توزیع سرعت برای جریان متلاطم
- ۳-۶ توزیع سرعت برای جریان آرام
- ۴-۶ مقایسه توزیع زمان اقامت جریان های آرام و متلاطم با مخزن ایده آل با اختلاط کامل
- ۵-۶ نمودار کانتورهای Lm_1 برای مخزن دو بعدی در شرایط عملیاتی متلاطم
- ۶-۶ نمودار کانتورهای Lm_1 برای مخزن دو بعدی در شرایط عملیاتی آرام
- ۱-۷ هندسه مخزن همزن دار سه بعدی با حجم $1/4$ لیتر
- ۲-۷ توزیع سرعت برای جریان متلاطم (حجم مخزن $1/4$ لیتر، دبی جریان ورودی 40 میلی لیتر در دقیقه و سرعت اختلاط 80 دور در دقیقه)
- ۳-۷ مقایسه توزیع زمان اقامت حاصل از نتایج شبیه سازی در شرایط متلاطم و توزیع زمان اقامت مخزن ایده آل اختلاط کامل
- ۴-۷ الف- پروفایل ممان طولی صفرام
- ۴-۷ ب- پروفایل ممان طولی صفرام، نمای بالا و در ارتفاع همزن
- ۴-۷ پ- پروفایل ممان طولی اول
- ۵-۷ الف- پروفایل ممان طولی صفرام در حالتیکه فقط پدیده به هم پیوستگی وجود داشته باشد
- ۵-۷ ب- پروفایل ممان طولی اول در حالتیکه فقط پدیده به هم پیوستگی وجود داشته باشد
- ۵-۷ پ- پروفایل ممان طولی سوم در حالتیکه فقط پدیده به هم پیوستن وجود داشته باشد
- ۶-۷ الف- پروفایل ممان صفرام در حالتی که فقط پدیده شکست وجود داشته باشد
- ۶-۷ ب- پروفایل ممان اول در حالتی که فقط پدیده شکست وجود داشته باشد
- ۶-۷ پ- پروفایل ممان سوم در حالتی که فقط پدیده شکست وجود داشته باشد
- ۷-۷ الف- پروفایل ممان صفرم طولی
- ۷-۷ ب- پروفایل ممان اول طولی
- ۷-۷ پ- پروفایل ممان سوم طولی

فهرست جداول

- ۱-۲ مکانیزم های مختلف سرعت رشد ذرات
- ۲-۲ کرنلهای سرعت به هم پیوستگی
- ۳-۲ مدل‌های تابع توزیع داتر
- ۴-۲ فاکتور فراوانی برخورد
- ۵-۲ مروری بر مدل‌های آشفستگی
- ۱-۴ ابعاد بافل ها و همزن راشتون
- ۲-۴ اندازه گیری های انجام شده برای تعیین توزیع زمان اقامت در مخزن بدون بافل
- ۳-۴ اندازه گیری های انجام شده برای تعیین توزیع زمان اقامت در مخزن دارای بافل
- ۱-۵ مقایسه ممان های حجمی و ممان های طولی
- ۲-۵ حداکثر خطای مدل سازی های دینامیک سیالات محاسباتی به روشهای SMOM و QMOM استفاده شده در کد دینامیک سیالات محاسباتی مطالعه موردی ۱ (هسته سازی) در محدوده زمانی ۰ تا ۱۰۰ ثانیه
- ۳-۵ حداکثر خطای روشهای SMOM و QMOM در خصوص محاسبه ممان های صفرا تا پنجم در بازه زمانی صفر تا ۱۰۰ ثانیه برای مطالعه موردی ۲: رشد
- ۴-۵ حداکثر خطای ناشی از مدل سازی به روش QMOM در بازه زمانی صفر تا ۱۰۰ ثانیه
- ۵-۵ حداکثر خطای ناشی از مدل سازی به روش QMOM در بازه زمانی صفر تا ۳۰ ثانیه
- ۱-۶ روابط بین ممان های طولی و حجمی
- ۲-۶ مقایسه انحراف متوسط و استاندارد توزیع زمان های اقامت بدست آمده از شبیه سازی با حالت ایده آل
- ۳-۶ مقایسه ممان های معادله موازنه جمعیت، بدست آمده از راه حل تحلیلی و شبیه سازی های انجام شده در جریانهای آرام و متلاطم
- ۴-۶ مقایسه ممان های معادله موازنه جمعیت، بدست آمده از راه حل تحلیلی و شبیه سازی های انجام شده در جریانهای آرام و متلاطم
- ۵-۶ مقایسه ممان های معادله موازنه جمعیت، بدست آمده از راه حل تحلیلی و شبیه سازی های انجام شده در جریانهای آرام و متلاطم
- ۶-۶ مقایسه ممان های معادله موازنه جمعیت، بدست آمده از راه حل تحلیلی و شبیه سازی های انجام شده در جریانهای آرام و متلاطم

- ۶-۷ مقایسه ممان های معادله موازنه جمعیت، بدست آمده از راه حل تحلیلی و شبیه سازی های انجام شده در جریانهای آرام و متلاطم
- ۷-۱ مقایسه انحراف استاندارد و متوسط توزیع زمان اقامت برای مخزن ۱/۴ لیتری با دبی خوراک ۴۰ میلی لیتر در دقیقه و سرعت همزن ۸۰ دور در دقیقه
- ۷-۲ مقایسه نتایج حل الگوریتم QMOM و نتایج حل تحلیلی برای ممانهای موازنه جمعیت در حالتی که پدیده های هسته سازی و رشد وجود داشته باشند
- ۷-۳ مقایسه نتایج حل الگوریتم QMOM و نتایج حل تحلیلی برای ممانهای موازنه جمعیت در حالتی که فقط پدیده به هم پیوستگی وجود داشته باشد
- ۷-۴ مقایسه شبیه سازی QMOM انجام شده با حل تحلیلی برای حالتی که فقط پدیده شکست وجود داشته باشد
- ۷-۵ مقایسه شبیه سازی QMOM انجام شده با حل تحلیلی برای حالتی که پدیده های هسته سازی، رشد و به هم پیوستگی به صورت توأم وجود داشته باشند

فصل ۱

مقدمه

کریستالیزاسیون یکی از فرآیندهای اصلی تولید در صنایع شیمیایی و دارویی به شمار می آید. بسیاری از مواد شیمیایی توده ای^۱، مواد دارویی و مواد شیمیایی ویژه بوسیله فرآیندهای کریستالیزاسیون پیوسته یا ناپیوسته تولید می شوند.

بر اساس تحقیق انجام شده توسط ر. دیویس دوپونت^۲، امروزه بیش از ۸۰ درصد شرکت های شیمیایی بزرگ، محصولات نهایی خود را بصورت ذرات ریز تولید می کنند. موارد زیر نمونه هایی از بکارگیری فرآیندهای کریستالیزاسیون و ته نشینی در تولید مواد گوناگون در صنایع امروزی هستند؛ مواد شیمیایی توده ای همچون نمکهای NaCl ، CaCl_2 ، NaCO_3 ، NaN_2 ، NaN_3 ؛ مواد کاتالیستی همچون شبه - بوامیت^۳، ژلهای آلومینا^۴ و سیلیکاژل ها^۵؛ پودرهای سرامیکی همچون SrTiO_3 ، ZrO_2 ، SiO_2 ، BaTiO_3 ، مولیت و TaO_2 ؛ مواد مغناطیسی همچون Cr_2O_3 ، Fe_2O_3 ؛ مواد پاک کننده فاضلاب های محیطی همچون خثی سازهای پایه اسیدی و افزایش دهنده های یون آلومینوم؛ کودها همچون NH_4NO_3 و بسیاری از فسفاتها؛ مواد ساختمانی همچون $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ یا گچ و نهایتاً داروها.

توزیع اندازه ذرات^۶ یا به عبارتی توزیع اندازه کریستالها^۷ به عنوان مهمترین پارامتر در فرآیند کریستالیزاسیون، به کمک معادله موازنه جمعیت^۸ پیش بینی می شود. معادله موازنه جمعیت همان معادله پیوستگی برای سیستم های دارای ذرات ریز است. موازنه جمعیت علاوه بر کریستالیزاسیون و ته نشینی در مدل سازی برجهای حبابی، پخش گاز^۹، اسپری ها، پلیمریزاسیون در بستریال، دانه دانه سازی^{۱۰}، آسیاب کردن مرطوب، پراکندگی مایع-مایع، هیدروسیکلونها، ایرکلسیفایرها^۱، کلاسیفایر های ذرات و جریان ذرات معلق در هوا، نیز کاربرد دارد.

¹ Bulk

² R. Davis, DuPont

³ Pseudo-boehmite

⁴ Alumina Gel

⁵ Silica Gel

⁶ Particle Size Distribution (PSD)

⁷ Crystal Size Distribution (CSD)

⁸ Population Balance Equation (PBE)

⁹ Gas Sparging

¹⁰ Granulation

به علت عدم وجود روشهای معتبر، پیش بینی موفق و دقیق خصوصیات ذرات تولیدی در شرایط متفاوت اختلاط، عموماً دشوار است، زیرا اصولاً می بایست پارامترهای متعددی در معادلات موازنه مومنتوم، جرم، انرژی و جمعیت لحاظ گردد. در معادله موازنه جمعیت لازم است عبارات مربوط به پدیده های هسته سازی، رشد، به هم پیوستگی و شکست که با معادلات موازنه مومنتوم، جرم و انرژی همبسته هستند، به درستی در نظر گرفته شوند.

هدف این تحقیق، تهیه، ارزیابی و اثبات اعتبار یک مدل دینامیک سیالات محاسباتی برای کریستالیزاسیون بر پایه معادله موازنه جمعیت است. این مدل، راهنمایی مناسب برای طراحی، کنترل و بهینه سازی فرآیند های کریستالیزاسیون در واحد های صنعتی خواهد بود.

در متون علمی جستجویی در خصوص راه حل های تحلیلی معادله موازنه جمعیت انجام شد و نتایج حل تحلیلی معادله موازنه جمعیت با نتایج حل معادله مذکور به کمک مدل های مختلف دینامیک سیالات محاسباتی تهیه شده در شرایط عملیاتی یکسان مقایسه گردید. این ارزیابی، قدمی بسیار مهم در مدلسازی معادله موازنه جمعیت و پیش بینی توزیع اندازه کریستالها است.

اولین قدم اجرایی در این تحقیق بررسی میدان سیال، انرژی سینتتیک و سرعت پراکنش انرژی است که در فصل ۳ به آن پرداخته شده است. ارزیابی و اثبات اعتبار مدل دینامیک سیالاتی توزیع زمان اقامت، به کمک داده های تجربی و مدل ایده آل مخزن همزن دار در فصل ۴، انجام شده است.

به منظور ارزیابی صحت و دقت مدل موازنه جمعیت ایجاد شده در محیط دینامیک سیالات محاسباتی، از راه حل های تحلیلی معادله موازنه جمعیت استفاده شده است. ارزیابی مذکور برای پدیده های هسته سازی، رشد، به هم پیوستگی و شکست به صورت ترکیبی یا منفرد، انجام شده است. بررسی کریستالیزور ناپیوسته در فصل ۵ و کریستالیزور پیوسته در فصول ۶ و ۷ انجام شده است. در فصل ۶ یک مخزن همزن دار پیوسته و ساده شده دو بعدی و در فصل ۷ یک مخزن همزن دار پیوسته سه بعدی با ابعادی مشابه مخزن تجربی در نظر گرفته شده در فصل ۴، مدل سازی شده است. فصل ۸ نیز به بحث، نتیجه گیری و جهت گیری های آتی اختصاص داده شده است.

¹ Air Classifier

فصل ۲

اصول اولیه

۱-۲ مقدمه

در این فصل مدلسازی های ماکروسکپی و دیفرانسیلی مورد بحث قرار خواهند گرفت. در مدل سازی ماکروسکپی، کل کریستالیزور بصورت کاملاً بهم آمیخته، در نظر گرفته میشود و به گرادیناهای درون کریستالیزور توجهی نمی شود در صورتیکه در مدل سازی دیفرانسیلی، گرادین های درون کریستالیزور نیز در محاسبات لحاظ میگردند. تغییرات غلظت، سرعت و نرخ پراکنش تلاطم که پدیده های هسته سازی، رشد، به هم پیوستگی و شکست را تحت تاثیر قرار می دهند، از جمله این گرادیناها هستند. با افزودن موازنه جمعیت به محاسبات دینامیک سیالات محاسباتی، امکان کوپل کردن پدیده های دارای ذرات ریز محاسباتی با پدیده های متلاطم^۱ پیش می آید. اصولاً مدل های دیفرانسیلی، دقیق تر هستند ولی به دلیل پیچیدگی های بیشتر به زمان محاسباتی بیشتری نیازمندند.

۲-۲ مدل سازی ماکروسکپی

در مدل سازی ماکروسکپی، کل کریستالیزور بصورت کاملاً بهم آمیخته در نظر گرفته شده و به تغییرات درون کریستالیزور توجهی نمی شود. به عنوان مثال برای یک کریستالیزور CST^۲ که کریستالیزور MSMPR^۳ یا CMSMPR^۴ نیز نامیده می شود، فقط خواص جریانهای ورودی و خروجی محاسبه میشوند و به دلیل اینکه درون کریستالیزور کاملاً بهم آمیخته فرض شده است خواص مواد درون کریستالیزور همانند خواص جریان خروجی خواهد بود. برای بدست آوردن توزیع اندازه ذرات در مدل سازی ماکروسکپی، حل معادلات موازنه جرم، انرژی و جمعیت لازم است. همچنین تعیین عبارات هسته سازی، رشد، به هم پیوستگی و شکست در معادلات موازنه جمعیت نیز ضروری است.

¹ Tubulent

² Continuous Stirred Tank

³ Mixed-Suspension, Mixed-Product-Removal

⁴ Continues Mixed-Suspension, Mixed-Product-Removal