بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده مهندسی شیمی و نفت و گاز

شبیه سازی CFD میکرو راکتور پرشده

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی شیمی- جداسازی

نگارش:

محمد جواد بختیاری

استاد راهنما:

دکتر فرامرز هرمزی

استاد راهنمای دوم:

دکتر شهره فاطمی

استاد مشاور:

دکتر سید حسن زوارموسوی

شهریور ۱۳۸۹

تعهد نامه اصالت اثر

اینجانب **محمد جواد بختیاری** تائید می‌کنم که مطالب مندرج در این پایان نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و به دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این نوشته از آن‌ها استفاده شده است مطابق مقررات ارجاع گردیده است. این پایان نامه قبلاً برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارائه نشده است.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشکده مهندسی شیمی **دانشگاه سمنان** می باشد.

نام و نام خانوادگی دانشجو: محمد جواد بختیاری

امضای دانشجو:

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم که در تمامی مراحل زندگی تکیه‌گاه و مشوّق من هستند و تا آخر عمر مدیون زحمات بی‌دریغشانم.

تقدیر و تشکر

حمد و سپاس به درگاه ایزد منان که توان کسب علم و دانش را به بشر ارزانی نمود.

با سپاس از استاد ارجمند جناب **آقای دکتر هرمزی** که بدون بهره‌گیری از راهنمایی های سودمند ایشان این پژوهش به انجام نمی‌رسید.

واژه‌های کلیدی

شبیه سازی، دینامیک سیالات محاسباتی، میکروراکتور پرشده ، واکنش متانول به هیدروژن، جذب سطحی

چکیده

در این پروژه شبیه سازی دینامیک سیالات محاسباتی میکروراکتور پرشده مورد مطالعه قرار گرفته است. شبیه سازی بر روی دو مورد مطالعاتی صورت پذیرفته است. مورد مطالعاتی اول،بررسی واکنش تولید هیدروژن از متان می باشد که در این قسمت به بررسی پارامترهایی چون سینتیک واکنش، دما و نسبت آب به متان در جریان خوراک می باشد. در شبیه سازی مربوط به سینتیک واکنش، سه سینتیک مورد بررسی قرار گرفته است به طوری که یکبار اثر آب حذف گردیده ویکبار اثر آب و هیدروژن حذف گردیده و در حالت سوم اثر تمامی اجزاء در نظر گرفته شده است. پارامتر دما و نسبت آب به متان در خوراک نیز در سه حالت مورد بررسی قرار گرفته به طوری که با افزایش دما میزان بازده افزایش می یابد و با افزایش نسبت آب به متان در خوراک میزان بازده به مقدار اندکی افزایش می یابد. مورد مطالعاتی دوم شامل شبیه سازی فرایند جذب سطحی می باشد. فرایند جذب دینامیک تک جزئی دو جریان گازی شامل دی اکسید کربن-هلیم و متان-هلیم مورد مطالعه قرار گرفته است. مدل جذب تعادلی لانگمیر به منظور بیان تعادل میان فاز گاز و فاز جامد در محاسبات مورد استفاده قرار گرفته است و نتایج شبیه سازی در قالب منحنی عبور شکست ارائه گردیده است. واکنش تولید هیدروژن و فرایند جذب سطحی در قالب ترم منبع به معادله بقاء اجزاء اضافه شده است. حل معادلات بقاء با استفاده از روش حجم محدود و به کمک نرم افزار Fluent 6.2 انجام گردیده است. انجام مراحل مربوط به تولید هندسه و شبکه بندی آن به کمک نرف افزار Gambit 2.0 انجام شده است.شبیه سازی مورد مطالعاتی اول در فضای سه بعدی و شبیه سازی مورد مطالعاتی دوم در فضای دو بعدی صورت پذیرفته است. در پایان با توجه به نتایج بدست آمده از شبیه سازی می توان به این نکته اشاره نمود که دینامیک سیالات محاسباتی توانایی بالایی در شبیه سازی فرایند های مختلف درون میکرو راکتورهای پر شده را دارا می باشد.

فهرست مطالب

فصل۱ مقدمه ۱

۱-۱. مقدمه ۲

۱-۲. مروری بر کارهای انجام شده ۴

فصل۲ مبانی نظری ۱۴

۲-۱. مقدمه ۱۵

۲-۲. مبانی سیستم های میکرو ۱۵

۲-۲-۲. مزایای سیستم های میکرو ۱۶

۲-۲-۳. میکرو راکتورها ۱۸

۲-۲-۳-۱. مزایای میکروراکتورها ۱۸

۲-۲-۳-۲. موانع و چالش ها ۲۰

۲-۲-۳-۳. پدیده های انتقال در میکرو راکتورها ۲۰

۲-۳. دینامیک سیالات محاسباتی ۲۵

۲-۳-۱. تاریخچه دینامیک سیالات محاسباتی ۲۵

۲-۳-۲. کاربرد CFD در راکتور های بستر پر شده ۲۸

۲-۳-۳. حل معادلات بقاء به روش CFD ۲۹

۲-۳-۳-۱. انتگرال گیری معادلات بقاء ۳۰

فصل۳ طراحی و ساخت دستگاه ۳۸

۳-۱. مقدمه ۳۹

۳-۲. تعیین طرح دقیق دستگاه ۳۹

۳-۳. تجهیزات خریداری شده ۴۰

۳-۳-۱. کنترل کننده جریان ۴۰

۳-۳-۲. سنسور فشار ۴۲

۳-۳-۳. آشکار ساز ۴۳

۳-۳-۴. سنسور دما ۴۳

۳-۳-۵. نمایشگر و فشارسنج صفحه ای ۴۴

۳-۳-۶. حمام ۴۵

۳-۳-۷. شیر ، لوله و اتصالات ۴۶

۳-۴. تجهیزات طراحی و ساخته شده ۴۶

۳-۴-۱. میکروراکتور ۴۶
۳-۴-۲. مخازن فشار و مخلوط کننده ۴۸
۳-۴-۳. چارچوب دستگاه ۴۸

فصل۴ شبیه سازی CFD **۵۱**

۴-۱. مورد مطالعاتی اول: فرایند تولید هیدروژن از متانول ۵۲
۴-۱-۱. تعریف مسئله ۵۲
۴-۱-۲. معادلات حاکم ۵۲
۴-۱-۲-۱. معادله پیوستگی ۵۲
۴-۱-۲-۲. معادله انرژی ۵۳
۴-۱-۳. تولید هندسه و شبکه بندی ۵۴
۴-۱-۴. پارامترهای فیزیکی ۵۵
۴-۱-۵. فرضیات ۵۷
۴-۱-۶. تاثیر مدل های سینتیکی ۵۸
۴-۱-۷. تاثیر دما بر بازده تبدیل متانول ۵۹
۴-۱-۸. تاثیر ترکیب خوراک ۵۹
۴-۲. مورد مطالعاتی دوم: فرآیند جذب سطحی ۵۹
۴-۲-۱. بیان مسئله ۵۹
۴-۲-۲. تولید هندسه و شبکه بندی ۵۹
۴-۲-۳. معادلات حاکم ۶۱
۴-۲-۳-۱. معادله انتقال اجزاء ۶۱
۴-۲-۴. فرضیات ۶۳

فصل۵ نتایج و بحث **۷۰**

۵-۱. مقدمه ۷۱
۵-۲. مورد مطالعاتی اول: فرایند تولید هیدروژن از متانول ۷۱
۵-۳. مورد مطالعاتی دوم: جذب سطحی ۷۴

فصل۶ نتیجه گیری **۸۹**

۶-۱. نتیجه گیری ۹۰
۶-۲. پیشنهادات ۹۱

فهرست اشکال

فصل۱ مقدمه ۱

فصل۲ مبانی نظری ۱۴

شکل۲-۱. نمایش دسته بندی فناوری ساخت میکروراکتور ها با توجه به بعد مشخصه آنها..... ۱۵
شکل۲-۲. سلسله مراتب مونتاژ یک میکروراکتور ۱۶
شکل۲-۳. حجم کنترل اطراف گره P..... ۳۲
شکل۲-٤. طرح اختلاف بالادست..... ۳۳

فصل۳ طراحی و ساخت دستگاه ۳۸

شکل۳-۱. دیاگرام جریانی فرایند ۴۰
شکل۳-۲. کنترل کننده جریان ۴۱
شکل۳-۳. سنسور فشار..... ۴۲
شکل۳-٤. دستگاه کروماتوگرافی گازی مجهز به آشکارساز TCD..... ۴۳
شکل۳-۵. سنسور دما $PT\text{-}100$ از نوع سه کابله ۴۴
شکل۳-۶. برش مقطعی از راکتور سمت راست و نمای کامل راکتور در سمت چپ ۴۷
شکل۳-۷. چهارچوب دستگاه به همراه سایر تجهیزات ۴۹

فصل۴ شبیه سازی CFD ۵۱

شکل٤-۱. هندسه وشبکه بندی مورد مطالعاتی اول ۵۴
شکل٤-۲. شبکه بندی هندسه جریان، مورد مطالعاتی دوم ۶۰

فصل۵ نتایج و بحث ۷۰

شکل۵-۱. مقایسه میان نتایج سه مدل سینتیکی و داده های تجربی در $T_w = 493\ K$ (مدل ۱ شامل تاثیر سه جزء $CH_3OH,\ H_2$ و CO_2 در رابطه توانی سرعت می باشد ، مدل ۲ شامل تاثیر دو جزء $CH_3OH,\ H_2$ در رابطه توانی سرعت می باشد ، مدل۳ شامل تاثیر تمامی اجزاء $CH_3OH,\ H_2O,\ H_2$ و CO_2 در رابطه توانی سرعت می باشد. ۷۱
شکل۵-۲. تغییرات کسر مولی اجزاء در راستای محوری..... ۷۲
شکل۵-۳. تاثیر دما بر بازده تبدیل متانول(نسبت بخار به متانول برابر ۱,۱ می باشد). ۷۲
شکل۵-٤. تاثیر نسبت آب به متانول در خوراک بر بازده تبدیل متانول $(T_w = 493\ K)$..... ۷۳
شکل۵-۵. شبیه سازی اجرا ۱ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی، پایین. ۷۴
شکل۵-۶. شبیه سازی اجرا ۲ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۲، پایین. ۷۵
شکل۵-۷. شبیه سازی اجرا ۳ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربیاجرا ۳، پایین..... ۷۶

شکل۵-۸. شبیه سازی اجرا ۴ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۴، پایین.....۷۷
شکل۵-۹. شبیه سازی اجرا ۵ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۵، پایین.....۷۸
شکل۵-۱۰. شبیه سازی اجرا ۶ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۶، پایین.....۷۹
شکل۵-۱۱. شبیه سازی اجرا ۷ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۷، پایین.....۸۰
شکل۵-۱۲. شبیه سازی اجرا ۸ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۸، پایین. ۸۱
شکل۵-۱۳. شبیه سازی اجرا ۹ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۹، پایین.....۸۲
شکل۵-۱٤. شبیه سازی اجرا ۱۰ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۱۰، پایین. ۸۳
شکل۵-۱۵. شبیه سازی اجرا ۱۱ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۱۱، پایین. ۸۴
شکل۵-۱۶. شبیه سازی اجرا ۱۲ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۱۲، پایین. ۸۵
شکل۵-۱۷. شبیه سازی اجرا ۱۳ ، بالا. مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی اجرا ۱۳، پایین. ۸۶

فهرست جداول

فصل۱ مقدمه ۱

جدول ۱-۱ خلاصه کارهای انجام شده ۱۱

فصل۲ مبانی نظری ۱۴

جدول ۲-۱ معادلات حاکم بر جریان سیال ۳۰

جدول۲-۲ ضرایب معادله گسسته شده در شرایط یک، دو و سه بعدی ۳۴

جدول۲-۳ ضرایب مربوط به رابطه ی F و D ۳۵

فصل۳ طراحی و ساخت دستگاه ۳۸

فصل۴ شبیه سازی CFD ۵۱

جدول۴-۱ پارامترهای لنارد جونز ۵۷

جدول۴-۲ مشخصات فیزیکی میکروراکتور و کاتالیست ۵۷

جدول۴-۳ مدل های توانی سینتیک واکنش ۵۸

جدول۴-۴ مشخصات جاذب و بسترپرشده. ۶۱

جدول۴-۵ پارامترهای جذب سطحی تعادلی مدل لانگمیر در جاذب سیلیکالیت. ۶۴

جدول۴-۶ پارامترهای فیزیکی دی اکسیدکربن ، متان و هلیم ۶۵

جدول۴-۷ داده های تجربی برای اجراهای انجام شده با دی اکسیدکربن- هلیم و متان- هلیم. ۶۶

فصل۱

مقدمه

۱-۱. مقدمه

هدف این پایان نامه بررسی مدل سازی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD[۱]) میکرو راکتورهای پرشده است. میکرو راکتورها، ابزارهای مینیاتوری هستند که به دقت مهندسی طراحی شده و از آنها برای انجام فرایندهای مختلف در مقیاس ریز استفاده می شود.

میکروراکتورها برای مانیتورینگ زیست محیطی، به عنوان دستگاه‌های اندازه‌گیری برای بهینه‌سازی مستقیم فرآیند، به عنوان ابزار غربال‌گری کاتالیست، برای تولید میکروپیل‌های سوختی، و به خصوص برای سنتز و تولید میکروارگانیک در صنعت داروسازی به کار می‌روند. مزیت اصلی چنین میکرو سیستم‌هایی قابلیت حمل بالا، کاهش مصرف واکنشگرها، کم شدن تولید دور ریزها، کاربردهای قابل حمل و توزیع حرارتی مناسب به دلیل نسبت بالای سطح به حجم است.

استفاده میکرو ابزارها در زمینه مهندسی شیمی رشته ای نسبتا جدید است. برای نخستین بار در اوایل قرن بیستم گروهی از متخصصین دانشگاه آلمان سیستم های اندازه گیری میکرویی در فرایندهای شیمی را بکار بردند در همین راستا چند کتاب نیز تالیف شد. به دلیل کاربرد و مزایای استفاده از میکرو سیستم ها در حوزه مهندسی فرایند این بخش مورد توجه محققین دیگری نیز قرار گرفت به طوری که در سال ۱۹۲۳پژوهشگری به نام فریتز پرگل[۲] موفق به اخذ جایزه نوبل برای تحقیق بر روی میکرو آنالیزورهای شیمیای شد.

در حال حاضر میکرو سیستم ها، عملکرد مکانیکی، سیالاتی و شیمیایی کاملی را برای زمینه هایی مثل اندازه گیری وکنترل سیستم های بزرگتر یا تولید کالای مناسبتر دارا هستند.

CFD بر پایه محاسبات عددی استوار می باشد و برای سیستم های شامل جریان سیال به کار می رود. مدل سازیCFD شامل حل معادلات بقاء (معادلات نفوذ- جابه جایی) در هندسه جریان به صورت عددی است. در سیستم های جریان مهمترین و پیچیده ترین بخش حل میدان جریان است

[۱] Computational Fluid Dynamics

[۲] Fritz Pregl

همانطور که می دانیم به منظور بررسی میدان جریان و بررسی رفتار سیال نیاز است که معادله بقاء ممنتوم که همان معادله ناویراستوکس می باشد در تمامی هندسه جریان حل شود. بررسی مربوط به معادلات بقاء حاکم بر مسئله در فصل دوم مورد بررسی قرار گرفته است.

به منظور حل معادله ناویر-استوکس نیاز است میدان سرعت و میدان فشار به طور همزمان حل گردند واز آنجا که هر دو پارامتر فشار و سرعت به یکدیگر وابسته هستند حل همزمان این دو میدان دشوار است. CFD با استفاده برخی روش ها و الگوریتم ها مانند الگوریتم SIMPLER[1], SIMPLE[2] قادر خواهد بود این مشکل را حل کند. تا قبل از اختراع رایانه و ارتقاء این وسیله عملاً استفاده از روش CFD در مدل سازی سیستم های شامل جریان غیر ممکن بود و دلیل این امر حجم بالای محاسبات خصوصاً در سیستم های پیچیده ی مهندسی و فرایندی بود که حل عددی معادلات بقاء در سیستم های جریان به صورت دستی به دلیل فرایند تکرار در حل و اعمال حجم بالای محاسبات و اشتباهات انسانی عملاً روش CFD با وجودی که این علم از قرن ها پیش به وجود آمده بود، محجور مانده بود. ولی با اختراع و ارتقاء رایانه این امکان به وجود آمد تا از روش CFD در مدل سازی استفاده گردد و حجم بالای محاسبات به کمک فناوری رایانه ها تحت شعاع قرار گیرد در این پروژه نیز که اساس کار بر مدل سازی CFD و حل معادلات بقاء در سیستم های مینیاتوری می باشد هدف کار این می باشد که توانایی CFD را در مدل سازی فرایندهای مختلف درون سیستم های میکرویی را مورد بررسی ومطالعه قرار دهیم. بررسی معادلات بقاء یا انتقال حاکم بر سیستم های مینیاتوری و چگونگی حل این معادلات به روش CFD در فصل دوم مورد بحث قرار گرفته است.

معادلات انتقال که در حالت کلی به آنها معادلات نفوذ –جابه جایی نیز گفته می شود این معادلات علاوه بر ترم های نفوذ و جابه جایی شامل ترم دیگری به نام عبارت چشمه یا چاه می باشد. این ترم این امکان را فراهم می سازد که شرایط مختلف فرایندی و فرایند های مختلف را از این طریق وارد معادلات و در نتیجه وارد مدل سازی می گردد. به عبارتی دیگر ترم چشمه یا چاه در تمامی معادلات انتقال حضور دارد و امکان مدل سازی فرایند های متنوعی را فراهم می سازد. در این باب در فصول دوم و سوم بیشتر خواهیم پرداخت. در این پروژه علاوه بر حضور معادلات اصلی انتقال از قبیل جرم

[1] Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations Reformed

[2] Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations

(پیوستگی)، ممنتوم ، حرارت، معادله ی انتقال اجزاء به صورت خاص مورد توجه قرار گرفته است. به دلیل امکان و قابلیتی که ترم منبع این معادله دارا می باشد این امکان را فراهم می سازد که فرایند های مختلفی در مدل سازی تعریف گردد. از این طریق خواهیم توانست به افق پروژه که همانا توانای CFD در مدل سازی فرایند ها درون میکرو راکتور ها است، دست یافت .

در راستای انجام پروژه بر روی دو گزینه مطالعاتی به عنوان فرایند های مورد نظر ذکر شده در بالا به طور خاص مدل سازی صورت پذیرفت. گزینه مطالعاتی اول شامل فرایند تولید هیدروژن از متانول است و گزینه مطالعاتی دوم فرایند جذب دی اکسید کربن و متان می باشد.

به منظور استخراج نتایج تجربی وبررسی اثر برخی پارامتر ها بر فرایند های ذکر شده و همچنین تعین اعتبار نتایج مدل سازی تصمیم به ساخت یک دستگاه میکروراکتور اتخاذ گردید. در راستای انجام پروژه همزمان با پیش برد مرحله ی مدل سازی اقدام به ساخت دستگا ه میکرو راکتور گردید ساخت دستگاه شامل سه مرحله طراحی، خرید و ساخت بود با توجه به برخی مشکلات موفق به ساخت کامل و راه اندازی دستگاه در مدت زمان مشخص این پروژه نشدیم مراحل مربوط به ساخت دستگاه در فصل سوم آمده شده است. با توجه به این مشکل متعاقباً سعی گردید نتایج تجربی از مقالات استخراج گردد و با نتایج مدل سازی مقایسه گردد مراحل انجام مدل سازی در فصل چهارم و نتایج و بحث در فصل پنجم آورده شده است.

۱-۲. مروری بر کارهای انجام شده

در این بخش به بررسی کارهای انجام شده در حوزه مدل سازی میکرو راکتور ها به طور کلی و مدل سازی CFD به طور خاص و همچنین مدل سازی ها و مطالعاتی که بر روی دو فرایند مورد نظر در این پروژه (فرایند تولید هیدروژن از متانول و جذب سطحی) صورت پذیرفته خواهیم پرداخت .

در موارد محدودی بر روی مدل سازی این سیستم ها، مطالعه شده است. کجی اماتا[۱] و همکارانش در سال ۲۰۰۸ مطالعاتی بر روی این واکنش به کمک شبکه عصبی مصنوعی انجام دادند[۳۴]. در

[۱] Kohji Omata

مواردی هم، مدل سازی عددی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی انجام شده است. از آن جمله، در سال۲۰۰۸، تاکیا کیتااکا[۱] و همکارانش[۳۵] ریفرمینگ متانول با بخار را با استفاده از کاتالیست با ساختار صفحه ای Cu/ZnO مطالعه کردند. ضمن مطالعه آزمایشگاهی، آنالیزی از دینامیک سیالات محاسباتی انجام دادند.

آرزامندی[۲] و همکارانش[۱۱] در سال ۲۰۰۹ تحقیقی در زمینه مدل سازی CFD ارائه کردند. آنها در این تحقیق تاثیر دبی جریان ورودی در سه میکرو راکتور کانالی با اندازه دهانه مختلف را مورد بررسی قرار دادند. به منظور حل معادلات از روش حجم محدود و با استفاده از نرم افزار Fluent بهره جستند.

استفنیش[۳] و همکارانش[۹] در سال ۲۰۰۹ مطالعه ای پارامتری به روش CFD به منظور مشخص نمودن نواحی عملیاتی در یک میکروراکتور کاتالیستی صفحه ای انجام دادند. آنالیزهایی بر روی ناحیه واکنش انجام داده و همچنین نقش نواحی ای که جریان مسدود می گردد و جنس دیواره نیز مورد بررسی قرار داده اند.

کاو[۴] و همکارانش[۱۰] در سال ۲۰۰۵ تحقیقی در زمینه مدل سازی CFD فرایند ریفرمینگ متان در یک راکتور میکرو کانالی انجام داده اند. آنها تاثیر دو ساختار کاتالیستی بر میزان تبدیل متان را مورد بررسی قرار داده اند. از روش المان محدود و با کمک نرم افزار FEMLAB برای حل معادلات دیفرانسیل پاره ای استفاده کرده اند و توزیع دما و غلظت متان را در طول راکتور مشخص نمودند.

مطالعاتی بر روی سینتیک این واکنش با چند نوع کاتالیزور انجام شده است. یک نمونه از این مقالات توسط سنتاکساریا[۵] و همکارانش[۳۶] در سال ۲۰۰۹ انجام شده است. آنها مطالعاتی بر روی سینتیک این واکنش در راکتور بستر پرشده انجام دادند. شکل توانی را برای نرخ سرعت واکنش در نظر گرفتند و اثر خوراک و محصولات را در این قاعده توانی نرخ سرعت بررسی کردند. ازجمله موارد دیگری که در

---

[۱] Takuya Kitaoka

[۲] Arzamendi

[۳] Stefanidis

[۴] Cao

[۵] Santacesaria

آنها نرخ سرعت واکنش به صورت توانی از فشار جزئی مواد اولیه و محصولات بیان شده است، می توان به یانگ[۱] [۳۰] و استنگر[۲] [۳۱] و شماخر[۳] [۳۲] و کاو[۴] [۳۳] اشاره کرد.

دونگ هیون کیم[۵] و همکارانش[۳۷] در سال ۲۰۰۴ مطالعاتی بر روی سینتیک و ضریب کارایی در این واکنش با کاتالیزور تجاری $Cu/ZnO/Al_2O_3$ انجام دادند. آنها ضمن ارائه یک بازنگری از مدل های توانی انجام شده، یک مدل سینتیکی بر اساس سطوح جذب سطحی و تشکیل مواد حد واسط ارائه کردند و مدل توانی ساده شده خود را با این مدل سینتیکی مقایسه کردند.

آمادور[۶] و همکارانش در سال ۲۰۰۴ روی توزیع جریان در میکروراکتور ها با اندازه و هندسه متفاوت و تاثیر ساخت و انسداد کانال را بررسی کردند. آنها از نرم افزار فملب استفاده کردند و توزیع جریان برای دو نوع متفاوت از نظر ساختار شامل چند راهه متوالی و شاخه دار را بررسی کردند.

آوک[۷] و همکارانش در سال ۲۰۰۴ روی اختلاط در میکروراکتورها، تاثیر فرم قطعات لایه ای خوراک روی توزیع محصول برای واکنش های چندگانه فعالیت کردند و از نرم افزار فلوئنت برای محاسبه پروفایل سرعت و غلظت اجزا استفاده کردند.

آمادور و همکارانش در سال ۲۰۰۸ روی طراحی یک میکروراکتور شبکه ای برای توزیع جریان و توزیع زمان اقامت در یک کانال باریک تحقیق کردند. آزمایشات تجربی برای ارزیابی تصویری توزیع جریان در هندسه های متفاوت صفحات از نظر کیفی با داده های تئوری مطابقت دارد. همچنین مدل سازی المان محدود توسط فملب برای دستیابی به میدان جریان در هندسه های متفاوت انجام دادند.

یو[۸] و همکارانش در سال ۲۰۰۸ یک میکروراکتور جدید امگا شکل را برای تسهیل اختلاط و افزایش تبدیل با نرم افزار MemCFD مدل کردند. نتایج نشان داد که میزان تبدیل در این نوع بیشتر از مقادیر میکروکانل های مستقیم و زیگزاگ می باشد.

---

۱ Yang
۲ Stenger
۳ Schomäcker
۴ Chunshe Cao
۵ Dong Hyun Kim
۶ Amador
۷ Aoke
۸ Yu

ونگ[۱] و گروهش در سال ۲۰۰۹ روی بازده اختلاط در یک لوله مویین با محیط متخلخل نو در میکروراکتور T شکل آزمایشاتی انجام دادند. پن[۲] و همکارانش نیز در سال ۲۰۰۹ توزیع سرعت جریان در طول میکروکراکتور با انشعاب سه شاخه را با نرم افزار فلوئنت مدل کردند و نتایج را با مدل مقاومت شبکه مقایسه کردند.

وی یو[۳] و همکارانش[۱۹،۲۰] از جمله محققینی می باشند که به بررسی و مدل سازی *CFD* فرایند جذب سطحی درون یک ستون پرشده پرداختند. این گروه یک مجموعه تحقیق در این زمینه انجام داده اند که در هر تحقیق(در قالب یک مقاله) به بررسی یک سری پارامتر و شرایط حاکم بر فرایند جذب سطحی پرداخته اند. اولین کار ارائه شده توسط این گروه در سال ۲۰۰۲ بود که شامل مدل سازی فرایند جذب سطحی از یک جریان مایع سه جزئی می باشد. آنها در این کار توانستند پیک های تولید شده در ستون کروماتوگرافی از نوع *(HPLC)*[۴] را مدل سازی کنند و با موفقیت به پیش بینی رفتار پیک یک جریان سه جزئی بپردازند. در این کار آنها توانستند ترم جذب سطحی $(1-\varepsilon)\frac{\partial q}{\partial t}$ را به معادله انتقال اجزاء اضافه کنند که این کار برای اولین بار در حوزه *CFD* صورت پذیرفت و همچنین از یک رابطه خطی برای توصیف ایزوترم استفاده نمودند و همچنین فرایند جذب سطحی را تعادلی در نظر گرفتند. بدین صورت که فاز سیال در تعادل با فاز جامد می باشد و مقاومت انتقال جرم را به صورت کپه ای[۵] در نظر گرفتند و ضریب انتقال جرم را از شیب نمودار *HETP*[۶] با سرعت محاسبه کردند.

در سال ۲۰۰۳ این گروه[۱۹] کار دیگری را ارائه کردند. در این کار فرایند جذب از جریان مایع دو جزئی مورد بررسی قرار گرفت و مانند کار پیشین با موفقیت به پیش بینی رفتار پیک، جریان دو

---

[۱] Wang
[۲] Pan
[۳] Y. X. Wu
[۴] High Performance Liquid Chromatography
[۵] Lumped
[6] Height Equivalent Theoretical Plate

جزئی پرداختند. در این تحقیق آنها از دو مدل انتقال مختلف در راستای مدل سازی استفاده کردند و از ایزوترم لانگمیر[1] اصلاح شده برای توصیف تعادل بین دو فاز سیال و جامد استفاده کردند.

نکته مشترک در کارهای ارائه شده توسط این گروه این می باشد که از توزیع شعاعی صرف نظر گردیده و تنها توزیع محوری محسوب گردیده و به عبارتی دیگر جریان به صورت یک بعدی مدل سازی گردیده است.

آگیر[2] و همکارانش[۲۱]در سال ۲۰۰۸ نیز به بررسی کاربرد *CFD* در محاسبات جذب سطحی پرداختند. آنها در تحقیق خود به بررسی اثر هیدرودینامیک جریان بر روی جذب سطحی در مقیاس آزمایشگاهی و صنعتی پرداختند. آنها در این کار پدیده توزیع جریان سیال را در دو حالت یک بعدی (تنها توزیع محوری[3]) و دو بعدی (توزیع محوری و شعاعی[4]) را مورد بررسی قرار دادند و تاثیر آنرا بر مدل سازی فرایند مورد بحث قرار دادند.

آنها همچنین از بیانی دقیق تر نسبت به تحقیق وی یو و همکارانش در رابطه با ضریب انتقال جرم استفاده کردند به طوری که هم مقاومت لایه ی خارجی در برابر انتقال جرم و هم مقاومت داخلی فاز سیال در نظر گرفته شده است. که این خود مدلی کامل تر برای انتقال جرم درون فاز جامد (جاذب) می باشد.

کمپ[5] و همکارانش[۲۵] شبیه سازی فرایند کروماتوگرافی به کار رفته در جداسازی پروتئین ها را مورد بررسی قرار دادند. آنها از مدل ریاضی کامل در شبیه سازی خود بهره جستند و معادلات را توسط برنامه شخصی رایانه ای حل نمودند. مدل کروماتوگرافی در نظر گرفته شده شامل توزیع محوری در فاز مایع و مقاومت داخلی و خارجی انتقال جرم و مدل جذب غیر خطی می باشد. شبیه سازی در هر دو حالت سیستم تک جزئی و چند جزئی انجام داده اند.

نتایج به دست آمده از مدل انتخابی با دیگر مدل های ساده تر مقایسه گردیده است . مدل سازی را به کمک برنامه SIMCHROM انجام داده آنها نشان داده اند که مدل انتخابی شان قابلیت توصیف

---

[1] Langmuir Isotherm

[۱] Augier

[۲] Axial Dispersion

[۳] Radial Dispersion

[٤] Kempe