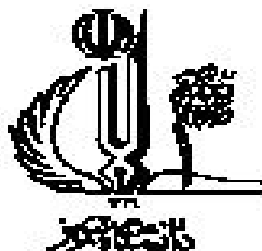


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه تبریز

دانشکده مکانیک

گروه مهندسی شیمی و نفت

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

مهندسی شیمی-فرایند

عنوان:

**شبیه سازی فرایند تبدیل گاز طبیعی به آروماتیک ها (GTL) به
روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)**

استاد راهنما:

دکتر علی فرضی

استاد مشاور:

دکتر علیقلی نیایی

دانشجو:

محسن روحی

بهمن ۱۳۹۳

تقدیم به :

پدر و مادر مهربانم که با یاری و کمک بسیار مشوق اصلی من بوده و در دوران تحصیل فرزندشان همه مشکلات را با صبر و حوصله تحمل کردند.

سپاسگزاری :

سپاس خداوند مهربان را که اندیشه‌ام داد.

حمد و سپاس بی قیاس خدای را سزااست که از الطاف خود در انسان دمید و او را اشرف مخلوقات خود قرار داد. حال که به لطف او توفیق تحصیل علم و کسب دانش را پیدا نموده‌ام، از خداوند متعال می‌خواهم قدم‌هایم را در راه خدمت به جامعه استوار گرداند تا بتوانم از آنچه در این سال‌ها آموختم در مسیر پیشرفت و آبادانی کشور عزیزم استفاده نمایم.

از دکتر علی فرضی و دکتر علیقلی نیایی که راهنمایی‌های بسیار خوبی در طول انجام این تحقیق داشتند و دلسوزانه مرا راهنمایی کردند، صمیمانه تشکر و قدر دانی می‌نمایم.

نام خانوادگی دانشجو : روحی	نام : محسن
عنوان پایان نامه : شبیه سازی فرایند تبدیل گاز طبیعی به آروماتیک ها (GTL) به روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)	
استاد راهنما : دکتر علی فرضی استاد مشاور : دکتر علیقلی نیایی	
مقطع تحصیلی : کارشناسی ارشد	رشته : مهندسی شیمی
دانشگاه : دانشگاه تبریز	دانشکده : مهندسی مکانیک
تاریخ فارغ التحصیلی : بهمن ماه ۱۳۹۳	تعداد صفحات : ۶۸
کلید واژه : GTL، دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)، تبدیل گاز طبیعی به مایع، آروماتیزاسیون	
<p>چکیده : فن آوری GTL تبدیل گاز طبیعی به صورت مایع می باشد که طی آن هیدروکربن های خطی و محصولات اکسیژن دار تولید می شوند. محصولات به دست آمده با توجه به شرایط عملیاتی و نوع کاتالیزور به کار رفته متفاوت است و ممکن است از C_2 تا C_{60} را شامل شود. در این کار شبیه سازی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی فرایند GTL در یک راکتور بستر ثابت با کاتالیست زئولیتی Mo/Hzsm-5 در مسیر مستقیم از روش تبدیل غیر اکسایشی متان به آروماتیک ها انجام شده است. نتایج حاصله با اطلاعات تجربی موجود در مقالات مقایسه و اعتبار سنجی شده است.</p> <p>در این کار هندسه مدل با استفاده از نرم افزار گمبیت و شبیه سازی به وسیله نرم افزار فلوئنت انجام شده است. تأثیر دما از ۹۱۳ تا ۹۷۳ کلوین و سرعت فضایی ۷۰۰، ۱۴۰۰ و ۲۱۰۰ mL/g.h در این شبیه سازی مورد ارزیابی قرار گرفته است. نتایج نشان داد که با افزایش دما میزان تولید هیدروژن و بنزن افزایش یافته و با افزایش سرعت فضایی تولید کاهش می یابد. بنابراین دمای بهینه در بازه مورد بررسی ۹۷۳ کلوین و سرعت فضایی بهینه در بازه مورد بررسی ۷۰۰ mL/g.h می باشد. نتایج بدست آمده تطابق خوبی با داده های تجربی نشان دادند به گونه ای که درصد خطا برای کسر مولی هیدروژن ۱۴/۳٪ و درصد خطا برای کسر مولی بنزن ۳/۶٪ می باشند.</p>	

فهرست مطالب

۱	فصل ۱: مقدمه و مروری بر منابع
۲	۱-۱- معرفی فرایند تبدیل گاز به مایع.....
۵	۲-۱- روش‌ها و مسیر های مختلف تبدیل متان.....
۸	۳-۱- معرفی دینامیک سیالات محاسباتی.....
۹	۱-۳-۱- یک برنامه CFD چگونه کار میکند؟.....
۱۰	۱-۳-۱-۱- پیش پردازنده.....
۱۱	۱-۳-۱-۲- حل کننده.....
۱۲	۱-۳-۱-۳- پس پردازنده:.....
۱۳	۴-۱- اهداف و ضرورت های انجام تحقیق.....
۱۵	۵-۱- مروری بر منابع.....
۱۵	۱-۵-۱- روند توسعه کاتالیست‌های مورد استفاده در مسیر غیر اکسایشی متان.....
۱۵	۱-۵-۱-۱- تأثیر طبیعت پایه کاتالیست.....
۱۵	۱-۵-۱-۲- تأثیر طبیعت فلز پراکنده شده در پایه.....
۱۶	۱-۵-۱-۳- اضافه کردن فلز ثانویه به عنوان بهبوددهنده.....
۱۶	۱-۵-۲- بررسی سینتیک ارائه شده.....
۱۸	۱-۵-۳- راکتور های بررسی شده به وسیله دینامیک سیالات محاسباتی.....
۲۲	۱-۵-۴- تأثیر پارامترهای عملیاتی در تبدیل غیر اکسایشی متان.....
۲۲	۱-۵-۴-۱- تأثیر دما.....
۲۴	۱-۵-۴-۲- تأثیر سرعت فضایی.....
۲۵	فصل ۲: شبیه سازی با CFD
۲۶	۱-۲- مدل سازی بسترهای ثابت.....
۲۶	۱-۱-۲- مشکلات ابتدایی در مدل سازی های بستر ثابت.....
۲۸	۲-۲- مدل سازی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی (CFD).....
۲۹	۳-۲- معادلات حاکم بر مسئله.....
۲۹	۱-۳-۲- معادله اندازه حرکت.....
۳۱	۲-۳-۲- معادله پیوستگی.....
۳۱	۳-۳-۲- معادله بقا برای اجزای شیمیایی.....
۳۲	۴-۳-۲- افت فشار در راکتور های بستر ثابت.....
۳۲	۴-۲- مشخصات راکتور و کاتالیست.....
۳۴	۵-۲- ترسیم هندسه مدل در گمیت.....

۳۶	۶-۲- تنظیم و بکارگیری حل کننده.....
۳۸	۷-۲- تنظیم خواص فیزیکی.....
۴۰	۸-۲- شرایط مرزی.....

فصل ۳: نتایج و پیشنهادات

۴۲	
۴۳	۱-۳- خلاصه ای از شبیه سازی.....
۴۴	۲-۳- استقلال از شبکه.....
۴۵	۳-۳- نتایج مدل و مقایسه با اطلاعات آزمایشگاهی.....
۴۶	۱-۳-۳- بررسی اثرات دما.....
۵۰	۲-۳-۳- اثر سرعت فضایی.....
۵۳	۴-۳- بررسی سرعت واکنش.....
۵۳	۵-۳- توزیع محصولات در طول راکتور.....
۵۴	۶-۳- افت فشار.....
۵۶	۷-۳- نتیجه گیری.....
۵۷	۸-۳- پیشنهادات.....

۶۱	مراجع
----	-------

۶۶	پیوست
----	-------

فهرست اشکال

۵	شکل (۱-۱) مسیر بالقوه تولید سوخت های مایع بر پایه FTS [۴].....
۶	شکل (۲-۱) گام های اصلی فرایند GTL در مسیر غیرمستقیم [۴].....
۲۳	شکل (۳-۱) ترمودینامیک تبدیل مستقیم متان به آرومتیک ها تحت شرایط غیر اکسایشی [۲].....
۲۴	شکل (۴-۱) تاثیر دمای واکنش بر تبدیل متان و گزینش پذیری (MO/HZSM-5 2% در فشار یک اتمسفر) [۲].....
۳۳	شکل (۱-۲) شمایی از راکتور استفاده شده در این کار پژوهشی.....
۳۴	شکل (۲-۲) هندسه راکتور در نماهای مختلف.....
۳۵	شکل (۳-۲) شبکه بندی هندسه راکتور مورد استفاده.....
۳۶	شکل (۴-۲) وضوح بیشتر شبکه بندی.....
۴۰	شکل (۵-۲) پانل خواص فیزیکی مواد.....
۴۴	شکل (۱-۳) نمودار باقیمانده ها.....
۴۵	شکل (۲-۳) استقلال نتایج شبیه سازی از شبکه.....
exp)	شکل (۳-۳) مقایسه درصد مولی هیدروژن خروجی محاسبه شده و آزمایشگاهی در سرعت فضایی ۷۰۰ ml/g.h
۴۷	داده های تجربی و calc داده های حاصل شبیه سازی).....

- شکل (۳-۴) مقایسه درصد مولی بنزن خروجی محاسبه شده و آزمایشگاهی در سرعت فضایی 700 ml/g.h (exp داده های تجربی و calc داده های حاصل شبیه سازی)..... ۴۸
- شکل (۳-۵) نتایج درصد تبدیل متان حاصل از شبیه سازی در سرعت فضایی 700 ml/g.h ۴۹
- شکل (۳-۶) تغییرات کسر مولی هیدروژن در سرعت های فضایی مختلف در خروجی راکتور..... ۵۰
- شکل (۳-۷) ترکیب درصد مولی بنزن در سرعت های فضایی مختلف در خروجی راکتور..... ۵۱
- شکل (۳-۸) درصد تبدیل متان در سرعت های فضایی مختلف..... ۵۲
- شکل (۳-۹) ضریب نفوذ مؤثر متان در دمای 913 کلوین..... ۵۲
- شکل (۳-۱۰) تغییرات سرعت واکنش ها در طول راکتور در دمای 913 کلوین و سرعت فضایی 700 ml/g.h ۵۳
- شکل (۳-۱۱) توزیع محصولات در طول راکتور در دمای 913 کلوین و سرعت فضایی 700 ml/g.h ۵۴
- شکل (۳-۱۲) افت فشار در طول راکتور در دمای 913 کلوین و سرعت فضایی 700 ml/g.h ۵۴
- شکل (۳-۱۳) کانتور واکنش ۱-۱..... ۵۸
- شکل (۳-۱۴) کانتور واکنش ۱-۲..... ۵۸
- شکل (۳-۱۵) کانتور ترکیب درصد بنزن در طول راکتور..... ۵۹
- شکل (۳-۱۶) کانتور ترکیب درصد مولی هیدروژن در طول راکتور..... ۵۹
- شکل (۳-۱۷) کانتور افت فشار در طول راکتور..... ۶۰

فهرست جداول

- جدول (۱-۳) درصد خطای بین نتایج تجربی و شبیه سازی کسرمولی هیدروژن در سرعت فضایی ۷۰۰ ml/g.h ۴۷
- جدول (۲-۳) درصد خطای بین نتایج تجربی و شبیه سازی کسرمولی بنزن در سرعت فضایی ۷۰۰ ml/g.h ۴۹

فصل ۱:

مقدمه و مروری بر منابع

۱-۱- معرفی فرایند تبدیل گاز به مایع

امروزه بحران انرژی رامی توان یکی از مهمترین معضلات بشر دانست. بنابراین فکر استفاده بهینه از تمام منابع انرژی در چنین زمانی اندیشه‌ای ضروری است. با توجه به اهمیت روز افزون علمی-صنعتی گاز طبیعی در جهان، وجود منابع عظیم گاز طبیعی و اقتصادی نبودن انتقال آن به مراکز مصرف، نیاز روز افزون به سوخت‌های مایع تمیز و بالاخره روند رو به کاهش ذخایر نفت خام، یافتن راهی مناسب برای استفاده بهینه از این منابع از اهمیت خاصی برخوردار است [۱].

یکی از راه‌های استفاده از گاز طبیعی تبدیل آن به مواد با ارزش دیگر است. با توجه به کاهش منابع نفتی و افزایش قیمت نفت به عنوان یک ماده اولیه شیمیایی، در آینده نزدیک کاربرد زغال سنگ و به ویژه گاز طبیعی اهمیت فزاینده‌ای خواهد یافت. بنابراین تبدیل گاز طبیعی و زغال سنگ به سوخت‌های مایع، حجم عظیمی از سوخت قابل حمل را در اختیار قرار می‌دهد. دلیل دیگر اهمیت این فرایند، دور افتاده بودن منابع گاز و زغال سنگ است و بیشتر این منابع حتی به ساحل دریا نزدیک نیستند تا بتوان آنها را با کشتی حمل نمود. شوروی سابق، آفریقا و شرق آسیا حدود ۴۰٪ منابع گاز جهان را دارا می‌باشند، در حالی که نیاز بازار این مواد در آمریکا و اروپا بسیار بالا است. بنابراین لازم است که گاز طبیعی و فرآورده‌های حاصل از آن برای مصرف به اروپا و آمریکا صادر شوند [۱].

انتقال گاز طبیعی با خط لوله به طول و شرایط مسیر خط لوله بستگی دارد. برای مسافت‌های دور همراه با موانع طبیعی انتقال با این روش اقتصادی نیست. ضمن این‌که در انتقال گاز از کشورهای مختلف، همواره مسائل سیاسی اثر گذار هستند [۱].

فناوری تبدیل گاز طبیعی به مایع به عنوان عامل بالقوه‌ای جهت ایجاد تغییرات اساسی در شرکتهای

نفت و گاز جهان مطرح است. این فناوری می‌تواند امتیازات زیر را در بر داشته باشد [۱]:

- امکان استفاده بهتر از منابع انرژی مانند گاز طبیعی و زغال سنگ،

- کاهش وابستگی به ذخایر نفت خام به ویژه در مناطق دارای ذخایر گاز طبیعی فراوان،
- ایجاد درآمد و اشتغال در مناطق گاز خیز دنیا (رونق اقتصادی).

امروزه باتوجه به حساسیت‌های زیست محیطی از یک طرف و کاهش منابع نفتی از طرف دیگر، ضرورت استفاده از منابع عظیم گازی برای تامین بخشی از نیاز به مواد سوختی نظیر بنزین و گازوئیل را دو چندان کرده است [۱].

منابع زیاد گاز طبیعی توجهات را بر روی گزینه استفاده از آنها برای سوخت‌های هیدروکربن‌های سنگین معطوف کرده است. استفاده مؤثر از این منابع منجر به کاهش نگرانی‌ها در مورد سنتز گازهای گلخانه‌ای شده است و علاقه‌مندی به استفاده از گاز طبیعی به عنوان مواد اولیه برای به‌دست آوردن سوخت‌های جایگزین را افزایش داده است. این نیازمند یک عصر جدید است که در آن تکنولوژی‌های پاک و منابع تجدیدپذیر جایگزین سوخت‌های فسیلی می‌شوند. تلاش‌هایی برای استفاده از گاز طبیعی جهت تولید هیدروژن و هیدروکربن‌ها انجام شده است، اما منابع عظیم گاز طبیعی ذخیره شده در مکان‌های دور دست می‌باشند که استخراج آنها با هزینه انتقال بالا تحت تأثیر قرار می‌گیرد. به هر حال این هزینه رامی توان با تبدیل گاز طبیعی به هیدروکربن‌های سنگین کاهش داد [۲].

متان جزء اصلی گاز طبیعی و همچنین گاز زباله و یک محصول جانبی از پالایش نفت و فرایندهای شیمیایی است که دارای پتانسیل بسیار زیاد به عنوان یک منبع برای انرژی فسیل پاک یا به عنوان مواد اولیه است به شرطی که به نقطه استفاده اقتصادی رسیده شود. مخازن گاز طبیعی بزرگ و در سراسر دنیا پراکنده هستند، عمدتاً در خاورمیانه و روسیه مقدار تقریبی ذخایر تخمین زده شده تا پایان سال ۲۰۰۶، ۶۳۰۰ تریلیون فوت مکعب می‌باشد. اما تکنولوژی تبدیل این ذخایر به مواد شیمیایی و سوخت‌های مایع هنوز سردر گم مانده است که به علت پایداری شدید پیوندهای C-H در مولکولهای CH₄ می‌باشد [۳].

راه کارهای زیادی برای بهبود فرایندهای صنعتی که متان را به الفین‌ها، هیدروکربن‌های سنگین و

بنزین بوسیله روشهای مختلف توسعه یافته است. هر چند این فن‌آوری‌های صنعتی شامل گام‌های جداسازی گران می‌باشد و یا به دمای بالایی نیاز دارند، معمولاً در بالاتر از ۶۰۰ درجه سلسیوس باید انجام شوند که مصرف انرژی بالایی را به همراه خواهد داشت. از طرفی تعدادی از روشها این نیاز را از بین برده است و به اقتصاد فرایند بهبود بخشیده است و از طرف دیگر به علت پایداری بالای مولکول متان، واکنش‌های آن عموماً مقدار انرژی فعال‌سازی بالایی نیاز دارد و بایک بار فعال‌سازی، ننگ داشتن واکنش در محدوده معین شده کار دشواری می‌باشد. ترمودینامیک نامساعد برای واکنش‌های خود به خودی به این معنی است که بدون اکسید کننده قوی، تبدیل متان به هیدروکربن‌های سنگین در دماهای متوسط با استفاده از روش‌های کاتالیستی مرسوم دشوار خواهد بود. به طور متداول دو روش عملی با مقیاس بزرگ برای تبدیل به هیدروکربن‌های مایع استفاده میشود: تبدیل متانول به بنزین^۱ و سنتز فیشر – تروپش^۲. هر دوی این فرایندها با تولید گاز سنتز از متان شروع می‌شوند که عملیاتی با دمای بالا، گرماگیر و پر هزینه می‌باشند [۳].

روش مستقیم برای تبدیل متان به مواد شیمیایی و سوختها، گام میانی پر هزینه گاز سنتز را حذف می‌کند. تصور کلی این است که روش مستقیم سود اقتصادی متمایزی بر روش غیر مستقیم خواهد داشت، اما تا این تاریخ فرایندهای مستقیم به مرحله تجاری نرسیده است. محصولات حاصله عموماً دارای مقدار کمی می‌باشند وقتی که در حالت تک مسیر عملیات انجام می‌شود که جداسازی را مشکل و پر هزینه می‌سازد.

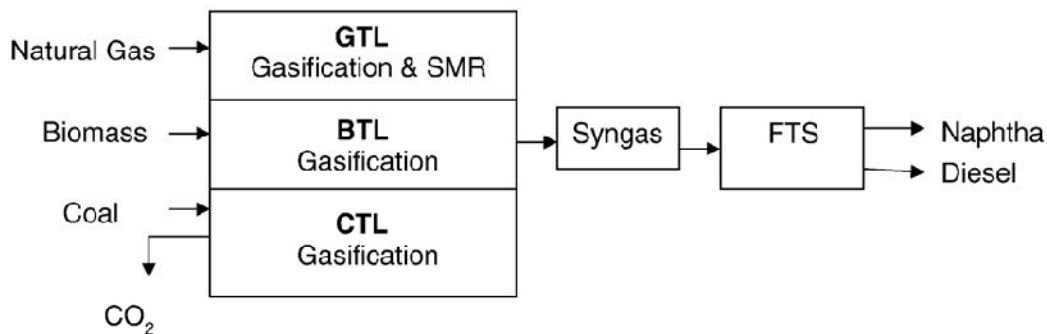
استفاده گسترده از متان برای تولید سوختها و مواد شیمیایی در زمان نزدیکی مقدور خواهد شد، اما اقتصاد نامعلوم، هر دوی فعالیت‌های تحقیقی و پیاده‌سازی فن‌آوری را محدود کرده است، هر چند استفاده گسترده از متان برای تولید سوختها و مواد شیمیایی انتظار می‌رود که بزودی واقعی شود [۳].

¹Methanol to gasolene

²Fischer tropesch

۱-۲- روش‌ها و مسیرهای مختلف تبدیل متان

سوخت GTL از گاز طبیعی، زغال سنگ و بیومس با استفاده از فرایند سنتز فیشر- ترپوش تولید می‌شود [۴]. مسیر بالقوه تولید سوخت‌های مایع بر پایه FTS در شکل ۱-۱ نشان داده شده است.



شکل (۱-۱) مسیر بالقوه تولید سوخت‌های مایع بر پایه FTS [۴]

مایعات تولید شده شامل نفتا، دیزل و مواد خام پتروشیمی می‌باشند. در نتیجه می‌توان دیزل GTL را به صورت خالص یا مخلوط با سوخت‌های دیزلی موجود در موتورهای دیزلی مورد استفاده قرارداد. این موضوع فرصتی را برای کاهش وابستگی به سوخت‌های بر پایه نفت خام فراهم می‌کند. مسیرهای مختلف تبدیل متان به هیدروکربن‌های مایع شامل موارد زیر است [۴]:

- تبدیل غیر مستقیم،
- تبدیل مستقیم.

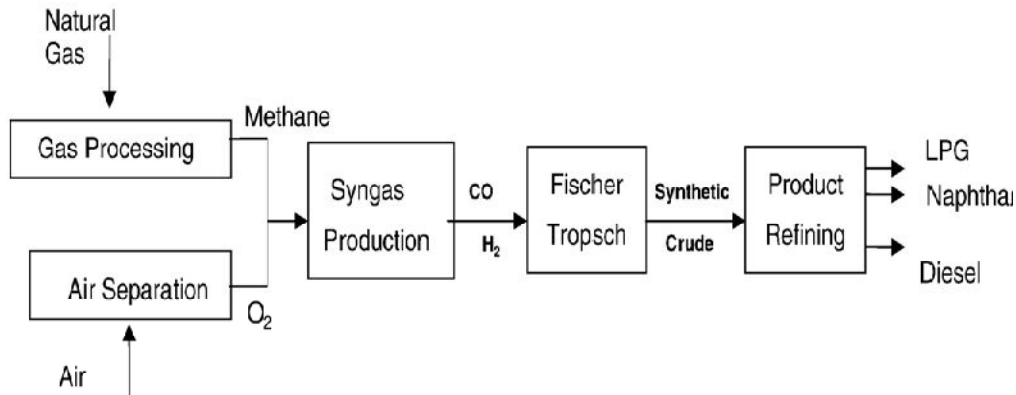
در حال حاضر فن‌آوری تجاری بر پایه مسیر غیر مستقیم است که شامل فرایندهای واکنشی

چندگانه می‌باشد. این فرایندها شامل پنج گام کلیدی می‌باشند [۴]:

- جداسازی هوا،
- پردازش گاز،
- تولید گاز سنتز،

- تبدیل گاز سنتز به نفت خام سنتزی^۱
- درجه بندی نفت خام سنتزی به وسیله هیدروپروسسینگ^۲ به محصولات قابل فروش.

شکل ۱-۲ توصیف کننده پنج گام بالا می باشد.



شکل (۱-۲) گام‌های اصلی فرایند GTL در مسیر غیرمستقیم [۴]

گاز سنتز نقطه شروع برای بسیاری از فرایندهای صنایع شیمیایی آلی محسوب می‌شود. در حالت کلی پایه و اساس دستاوردهای روش FTS به علت تکنولوژی تولید گاز سنتز می‌باشد. در دهه ۱۹۷۰ تکنولوژی گاز سنتز با سرعت زیادی تکامل یافت، اما همچنان به عنوان فرایندی با سرمایه‌گذاری و مصرف انرژی زیاد شناخته می‌شود [۴].

مسیر مستقیم تبدیل متان دارای عملکرد انرژی بهتری نسبت به مسیر غیر مستقیم می‌باشد، زیرا مسیر مستقیم، انرژی در یافتی در مرحله تشکیل گاز سنتز را ندارد. بنابراین روش مستقیم دارای سود اقتصادی ممتازی نسبت به روش غیر مستقیم خواهد بود، اما تاکنون روش مستقیم به مرحله تجاری نرسیده است. محصولات تولیدی روش مستقیم کم هستند و جداسازی آن‌ها مشکل و پرهزینه می‌باشد [۴].

مسیر تبدیل مستقیم متان دارای دو روش کلی می‌باشد که هر کدام دارای زیرمجموعه‌هایی می‌باشند [۵]:

¹ Syncrude

² Hydroprocessing

۱. تبدیل اکسایشی متان

۱.۱. اکسایش جفت شده^۱ متان به هیدروکربن‌های سنگین

۲.۱. اکسایش جزئی^۲ متان به ترکیبات اکسیژن‌دار

۳.۱. اکسایش همگن فاز مایع

۴.۱. اکسایش بیولوژیکی

۲. تبدیل غیراکسایشی^۳ متان

۱.۲. شکافت^۴ متان

۲.۲. شکافت اکسایشی و شکافت خود گرمایی^۵

۳.۲. ترکیبی از فرایندهای تبدیل متان

۴.۲. آروماتیزاسیون متان

دو روش دیگر موجود نیز تحت عناوین زیر می‌باشند [۵]:

- Methane halogenations and oxyhalogenation
- Microplasma activation

در این پروژه به علت کارهای آزمایشگاهی که در دانشگاه تبریز بر روی این فرایند در مسیر مستقیم

متان انجام شده است و از روش تبدیل غیراکسایشی متان به آروماتیک‌ها استفاده شده است، از این روش

استفاده خواهد شد.

¹ Oxidative coupling

² Partial oxidation

³ Non oxidative

⁴ Cracking

⁵ Autothermal

۱-۳- معرفی دینامیک سیالات محاسباتی

دینامیک سیالات محاسباتی یا CFD عبارت از تحلیل سیستم‌های شامل جریان سیال، انتقال حرارت و پدیده‌های همراه نظیر واکنش شیمیایی، بر اساس شبیه‌سازی رایانه‌ای است. CFD روش بسیار توانایی می‌باشد به طوری که طیف وسیعی از کاربردهای صنعتی و غیر صنعتی را در بر می‌گیرد، برخی مثال‌ها عبارتند از [۶]:

- نیروگاه: احتراق دستگاه‌های I.C و توربین‌های گاز
- توربو ماشین: جریان‌های داخلی گذرگاه‌های دوار، پخش‌کننده و غیره
- مهندسی دریا: بارهای روی ساختمان‌های ساحل
- مهندسی فرایند شیمیایی: اختلاط، جداسازی، راکتور، شکل‌گیری پلیمر

CFD به صورت یک جزء اساسی در طراحی تولیدات صنعتی و فرایندها درآمده است. هدف نهایی توسعه و پیشرفت در زمینه CFD رسیدن به توانایی قابل مقایسه با ابزارهای CAE (مهندسی به کمک رایانه) نظیر برنامه‌های تحلیل تنش می‌باشد. دلیل اصلی آنکه چرا CFD به کندی پیشرفت کرده است در حقیقت پیچیدگی زیاد رفتار اساسی آن وعدم بحث جریان سیال در رابطه با مسائل اقتصادی و مقرون به صرفه بودن آن است توضیح جریان که همزمان اقتصادی و کامل باشد و نیز وجود سخت افزارهای با عملکرد بسیار خوب محاسباتی و واسطه‌های با استفاده ساده منتقل به رشد جالبی شده و CFD موفق شد که در دهه ۱۹۹۰ در حد گسترده‌تری وارد حوزه ارتباطات صنعتی شود [۶].

قیمت تقریبی مجوز دائمی نرم افزارهای تجاری بین ۱۰۰۰۰ تا ۵۰۰۰۰ دلار بسته به تعداد اضافی مورد نیاز، متغیر است. روشن است که قیمت سرمایه‌گذاری روی توانایی‌های CFD کم نیست ولی هزینه کل به اندازه یک کار تجربی با کیفیت بالا نمی‌باشد. بعلاوه CFD در طراحی سیستم‌های سیالاتی چند مزیت منحصر به فرد نسبت به روش‌های تجربی دارا می‌باشد [۶]:

- کاهش اساسی در زمان و قیمت‌های طراحی جدید،

- توانایی مطالعه سیستم‌هایی که انجام آزمایشات کنترل شده روی آنها مشکل و یا غیر ممکن می‌باشد (نظیر سیستم های بزرگ)،
- توانایی مطالعه سیستمها، تحت شرایط تصادفی و بالاتر از حد معمول آنها.

۱-۳-۱- یک برنامه CFD چگونه کار میکند؟

ساختار برنامه CFD روش عددی است به طوری که مسائل جریان سیال با استفاده از این روش قابل حل می باشند. برنامه های CFD شامل روش های گسسته سازی مناسب برای حل پدیده های انتقالی مهم، جابه جایی، نفوذ و همچنین عبارات چشمه و نرخ تغییر نسبت به زمان می باشند. همچنین پدیده های فیزیکی پیچیده و غیر خطی می باشند، بنابراین یک روش حل تکرار مورد نیاز است. توضیح سازگاری، پایداری و فهم مناسب الگوریتم حل عددی نیز یک مسئله مهم است. سه اصل ریاضی در مشخص کردن کارایی یا عدم کارایی هر یک از الگوریتمها مفید است [۴۵]:

- همگرایی^۱
- سازگاری^۲
- پایداری^۳

همگرایی، خاصیتی از روش عددی برای به دست آوردن جوابی است که به حل دقیق نزدیک می‌باشد، به طوری که فاصله شبکه، اندازه حجم کنترل یا المان به صفر میل می‌کند. روشهای عددی سازگار، دستگاهی از معادلات جبری را ایجاد می‌کند، که می‌توان نشان داد با معادله حاکم اصلی زمانی که فاصله شبکه به سمت صفر میل می‌کند، معادل می‌باشد. پایداری در روش عددی با میرایی خطاها همراه

¹ Convergency

² Consistency

³ Stability

می‌باشد. اگر یک روش پایدار نباشد، حتی با گرد کردن خطاها در داده‌های اولیه، می‌تواند موجب واگرایی یا نوسانات زیاد گردد [۴۵].

به منظور فراهم آمدن دسترسی آسان به حل توام آنها تمام بسته های نرم افزاری تجاری CFD شامل واسطه های کاربری پیچیده ای جهت ورود پارامتر های مسائل می باشند، از این رو تمام برنامه‌ها شامل سه جزء اصلی می باشند [۶]:

- پیش پردازنده
- حل کننده
- پس پردازنده

۱-۳-۱-۱- پیش پردازنده

عبارت است از ورودی مسأله جریان به یک برنامه CFD با استفاده از یک واسطه عملکرد ساده و سپس تبدیل این ورودی به یک شکل مناسب برای استفاده توسط حل کننده، وظایف کاربر در مرحله پیش پردازنده عبارتست از [۶]:

- تعریف ناحیه مورد نظر میدان محاسباتی
- تولید شبکه یا تقسیم بخش های کوچک به نواحی کوچک تر
- تعریف خواص سیال
- تشخیص و تعریف شرایط مرزی لازم در سلول هایی که منطبق و یا در تماس با مرز محدوده می باشند.

بیش از ۵۰٪ زمان استفاده شده در صنعت روی پروژه CFD صرف تعیین هندسه محدوده و تولید شبکه می‌شود. در حال حاضر برای به حداکثر رساندن بهره مندی کاربران CFD، اغلب برنامه‌های مهم

شامل فصل مشترک با نرم افزار CAD بوده و یا از امکاناتی برای ورود اطلاعات از سطح سازه‌های تخصصی و تولید کننده‌های شبکه از جمله patran, gambit برخوردار می باشند [۶].

۱-۳-۱-۲- حل کننده

در این جا سه روش مجزا برای روش های عددی وجود دارد : اختلاف محدود ، عناصر محدود ، حجم محدود.

• اختلاف محدود

در این روش مجهولات مساله جریان را با استفاده از همسایه‌های هر نقطه در نقاط گره مربوط به شبکه خطوط مختصات تعیین می کنند. اغلب از بسط‌های تیلور منقطع برای به دست آوردن تقریب‌های اختلاف محدود مشتقات در عبارات همسایه‌های نقطه در هر شبکه و در همسایه‌های آن استفاده می شود، بنابراین مشتقات ظاهر شده در معادلات حاکم توسط اختلاف محدود جایگذاری شده و یک معادله جبری برای مقادیر در هر نقطه از شبکه را می دهند [۵۲].

• عناصر محدود :

در این روش عناصر محدود از توابع تکه ای ساده (خطی یا درجه دوم) که برای عناصر ارزش داشته باشند به منظور شرح تغییرات محلی متغیرهای مجهول جریان استفاده می شود. معادلات حاکم با استفاده از حل دقیق کاملاً ارضا می شوند. اگر توابع تقریب تکه‌ای برای در معادله جایگذاری شوند معادله دقیقاً ارضا نخواهد شد و یک باقی مانده برای اندازه‌گیری خطاها تعریف می شود. سپس باقیمانده‌ها در برخی جهات توسط ضرب آنها در یک مجموعه‌ای از توابع وزنی و انتگرال‌گیری به حداقل می رسند، در نتیجه ما یک مجموعه‌ای از معادلات جبری برای ضرایب مجهول توابع تقریب بدست می آوریم [۵۳].

• حجم محدود: