

هیئت داوران نشریه این دوره

دکتر روغنی مقناتی، حسین (دانشگاه صنعتی سهند)
 دکتر سردشتی بیرجندی، محمدرضا (دانشگاه شهید بهشتی)
 دکتر آقبلاغی، سمیرا (دانشگاه شهید مدنی آذربایجان)
 دکتر عظیمی زوزی، حمیدرضا (دانشگاه شهید مدنی آذربایجان)
 دکتر اسماعیلی فرج، سید حمید (دانشگاه صنعتی شاهرود)

دکتر سلیمانی، منصوره (دانشگاه صنعتی امیرکبیر)
 دکتر غفوری طالقانی، حمیدرضا (دانشگاه مازندران)
 دکتر مختارانی، بابک (پژوهشگاه شیمی و مهندسی شیمی ایران)
 دکتر ارجمند، مهدی (دانشگاه آزاد اسلامی - واحد تهران جنوب)
 دکتر عزیزپور، هدایت (دانشگاه تهران)
 دکتر سنگ پور، پروانه (پژوهشگاه مواد و انرژی)
 دکتر زینت لو، سحر (دانشگاه بناب)

دکتر دارابی، مریم (پژوهشگاه صنعت نفت)
 دکتر عصاره، مهدی (دانشگاه علم و صنعت ایران)
 دکتر میری، روحالدین (دانشگاه علم و صنعت ایران)
 دکتر کارخانه چی، حامد (دانشگاه فردوسی مشهد)
 دکتر باباپور، عزیز (دانشگاه محقق اردبیلی)
 دکتر امیری نژاد، مهدی (دانشگاه رازی کرمانشاه)



مروری بر گسترش نرم افزارهای مهندسی شیمی (بخش سوم)

در بخش‌های پیشین نخست توسعه نرم افزارهای مهندسی شیمی مرور و سپس نرم افزارهای عمومی برای مدل سازی ریاضی مباحث مهندسی شیمی معرفی شد. در این بخش نرم افزارهای شبیه سازیهای فرایند و همچنین دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) معرفی می شوند.

۲. شبیه سازیهای فرایند

شبیه سازی، طراحی و بهینه سازی یک واحد فرایند شیمیایی، فعالیت‌های اصلی در مهندسی فرایند است. انجام این وظایف نیاز به موازنه مواد و انرژی، برآورد اندازه پیش نیازها و محاسبه هزینه‌ها دارد. یک بسته رایانه‌ای که می تواند این وظایف را انجام دهد با عنوان «بسته طراحی فرایند به کمک رایانه» یا به زبان ساده تر «شبیه ساز فرایند» شناخته می شود. بازار شبیه سازی فرایند در دهه ۱۹۹۵-۱۹۸۵ دچار دگرگونی بسیاری شد. سامانه‌های انگشت شماری با موفقیت از این دوره گذر کردند؛ که عبارتند از:

SuperPro Designer, gPROMS, ProSimOlus, Aspen HYSYS, PRO/II, CHEMCAD, Aspen Plus.

۲-۱ Chemstations CHEMCAD

CHEMCAD، مجموعه نرم افزار Chemstations برای شبیه سازی فرایند است؛ از ویژگی های این نرم افزار می توان گسترش فرایند، طراحی پیش نیازها، برآورد اندازه پیش نیازها، محاسبه خواص حرارتی فیزیکی، شبیه سازی دینامیک، مطالعات تشدید فرایند، بهره‌وری انرژی/ بهینه سازی، تصحیح داده‌ها، اقتصاد فرایند، عیب‌یابی/ بهبود فرایند، میکروسافت ویژوال بیسیک و غیره را نام برد. مجموعه CHEMCAD شامل شش محصول است که می تواند در صورت نیاز برای صنایع، پروژه‌ها و فرایندهای خاص به صورت جداگانه یا بسته بندی خریداری شود.

۲-۲ ASPEN HYSYS & ASPEN PLUS

دو بسته نرم افزاری بسیار مشابه هستند که واجد تمام کارایی‌هایی اندک که یک شبیه ساز پردازش باید داشته باشد؛ این دو از گسترده ترین نرم افزارها در بین مهندسان شیمی هستند؛ AspenTech دارای سید گسترده‌ای از ابزارهای مدل سازی است که از مهم ترین و شناخته شده ترین آنها ابزارهای شبیه سازی فرایند Aspen Plus و Aspen Hysys است.

Aspen HYSYS (یا به طور خلاصه HYSYS) یک شبیه ساز فرایند شیمیایی است که برای مدل سازی ریاضی فرایندهای شیمیایی، از عملیات واحد تا واحدهای کامل فرایندهای شیمیایی و پالایشگاه‌ها استفاده می شود. HYSYS قادر است بسیاری از محاسبات اصلی مهندسی شیمی، مانند موازنه جرم، موازنه انرژی، تعادل بخار-مایع، انتقال حرارت، انتقال جرم، جنبش شناسی شیمیایی و غیره را

انجام دهد. HYSYS به طور گسترده در صنعت و دانشگاه برای شبیه سازی حالت پایدار و دینامیک، طراحی فرایند، مدل سازی عملکرد و بهینه سازی استفاده می شود. Aspen Plus، یک ابزار مدل سازی فرایند برای طراحی مفهومی، بهینه سازی و نظارت بر عملکرد در صنایع شیمیایی، تسپاری، شیمیایی خاص، فلزات و مواد معدنی و صنایع زغال سنگ است. همچنین می توان از آن برای موازنه جرم و انرژی، شیمی فیزیک، گرماپویاشناسی، مهندسی واکنش شیمیایی، عملیات واحد، طراحی فرایند و کنترل فرایند استفاده کرد. به طور کلی می توان گفت Aspen Plus ابزار بهتری برای طراحی فرایندهای شیمیایی مانند شیمی ریزدانه‌ها، مواد شیمیایی، دارویی و غیره است. در حالی که HYSYS برای عملیات هیدروکربنی، پتروشیمیایی، نفتی مانند گاز طبیعی، گازهای مایع، نفت خام و غیره ابزار بهتری است.

۳. دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)

دینامیک سیالات محاسباتی یا CFD، روش حل عددی معادلات بقاء جرم، حرکت، انرژی و اجزاء و پدیده‌های مرتبط با آنها با استفاده از زبان برنامه نویسی در رایانه است. CFD و مدل سازی و شبیه سازی چندفیزیکی در بسیاری از رشته‌های علمی و مهندسی قابل استفاده است. یک مهندس برای استفاده از CFD علاوه بر تخصص اصلی خود، نیاز به دانش گسترده و فهم فیزیکی، به ویژه دینامیک سیالات و انتقال جرم و حرارت دارد. مبانی CFD، معادلات دیفرانسیل جزئی است و بنابراین شناخت ریاضیات عددی برای حل آنها با روش عددی مناسب ضروری است. از آنجایی که این معادلات بقاء در رایانه‌ها طراحی و حل شده‌اند، دانش زبان‌های برنامه نویسی مانند FORTRAN، C++، Java یا MATLAB به همان اندازه اهمیت دارد. از ابزارهای مدل سازی نرم افزاری مبتنی بر CFD، که در جوامع علمی و مهندسی محبوب هستند، می توان به ANSYS Multiphysics، ANSYS Fluent، ANSYS CFX، ANSYS Multiphysics، STAR-CCM+ و STAR-CD، FLOW-3D، COMSOL Multiphysics و نرم افزار منبع باز OpenFOAM اشاره کرد. سایر ابزارهای نرم افزاری مبتنی بر CFD مانند AVL FIRE یا ANSYS Polyflow نیز در بازار موجود هستند که مخصوص سامانه‌های فیزیکی خاصی مانند موتورهای احتراق داخلی، قطارهای قدرت، بسپارها، شیشه، فلزات و فناوری‌های فرایند سیمان است. پرکاربردترین نرم افزارهای تجاری، مبتنی بر روش حجم محدود هستند، در حالی که برخی، از روش حجم کنترل مبتنی بر المان محدود و برخی دیگر از روش المان محدود استفاده می کنند.

دکتر احد قائمی

دانشیار دانشگاه علم و صنعت ایران

و عضو هیئت تحریریه نشریه مهندسی شیمی ایران