



Application of the Large Eddy Simulation Method in Numerical Study of Turbulent Flows in Stirred Tanks

S. Jafari Tadi¹, L. Nasr Azadani^{2*}

1- Ph. D. Student of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology

2- Assistant Professor of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology

Email: lazadani@aut.ac.ir

Abstract

Mixing with the aim of producing high-quality and homogeneous products is one of the important processes in chemical engineering. Mixing is usually performed in stirred tanks. The rotation of the stirrer in the stirred tank creates complex turbulent flows. Numerical simulation of such flows is challenging. In general, the numerical study of turbulent flows is performed using three methods, including Direct numerical simulation, Large eddy simulation and Reynolds averaged Navier-Stokes equations. Large eddy simulation is placed between the other two methods in terms of accuracy and computational cost, and with the increased computing power, large eddy simulation has received much attention in recent years. In this article, the research papers conducted on stirred tanks using the large eddy simulation method have been reviewed. Different models are compared and the most suitable models in large eddy simulation of turbulent flow in stirred tanks are presented.

Received: 14 April 2024

Accepted: 23 August 2024

Page Number: 148-160

Keywords:

Mixing,
Stirred Tank,
Computational Fluid
Dynamics,
Large Eddy Simulation

Please Cite this Article Using:

Jafari Tadi, S., & Nasr Azadani, L. (2025). Application of the Large Eddy Simulation Method in Numerical Study of Turbulent Flows in Stirred Tanks. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 24(139), 148-160, [In Persian].



کاربرد روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ در بررسی عددی جریان متلاطم در تانک‌های همزن‌دار

سارا جعفری طادی^۱، لیلا نصرآزادانی^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

۲- استادیار مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

پیام نگار: Lazadani@aut.ac.ir

چکیده

فرایند اختلاط، با هدف تولید محصولات باکیفیت و یکنواخت یکی از فرایندهای مهم مهندسی شیمی محسوب می‌شود. فرایند اختلاط، معمولاً در تانک‌های همزن‌دار انجام می‌شود. حرکت همزن در تانک‌های همزن‌دار جریان متلاطم پیچیده‌ای ایجاد می‌کند. شبیه‌سازی چنین جریانی بسیار دشوار و چالش‌برانگیز است. به‌طور کلی، بررسی و مطالعه عددی جریان‌های متلاطم با استفاده از سه روش شبیه‌سازی عددی مستقیم، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر-استوکس انجام می‌شود. روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ از نظر دقت و هزینه محاسباتی، بین دو روش دیگر قرار گرفته و با پیشرفت توان محاسباتی در سال‌های اخیر بسیار جلب توجه کرده است. در این مقاله، به مرور پژوهش‌های انجام‌شده بر تانک‌های همزن‌دار با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ پرداخته شده است. مدل‌های مختلف استفاده‌شده، مقایسه و مناسب‌ترین مدل برای شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ جریان در تانک‌های همزن‌دار پیشنهاد می‌شود.

کلیدواژه‌ها:

اختلاط،
تانک همزن‌دار،
دینامیک سیالات محاسباتی،
شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۱/۲۶
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۶/۰۲
شماره صفحات: ۱۴۸ تا ۱۶۰

* تهران، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی شیمی

استناد به مقاله:

جعفری طادی، سارا و نصرآزادانی، لیلا. (۱۴۰۴). کاربرد روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ در بررسی عددی جریان متلاطم در تانک‌های همزن‌دار، نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۴(۱۳)، ۱۶۰-۱۴۸.

۱. مقدمه

فرایند اختلاط در صنایع مختلف، از قبیل: شیمیایی، زیست‌فناوری، دارویی، محیط زیست، پلیمری و نفت خام کاربرد دارد. فرایند اختلاط، می‌تواند برای رسیدن به اهداف مختلفی نظیر بهبود فرایندهای انتقال جرم و انتقال حرارت، جداسازی و واکنش‌های شیمیایی استفاده شود [۱]. برای انجام فرایند اختلاط در صنایع مختلف از تانک‌های همزن دار استفاده می‌شود. کیفیت اختلاط به ویژگی‌های هندسی مخزن و همزن و خواص فیزیکی سیال بستگی دارد [۲-۴]. به‌طور کلی، رفتار جریان حتی در یک تانک همزن دار ساده، پیچیده است. فرایندهای اختلاط اغلب متلاطم هستند و شناخت کلی از تأثیر تلاطم بر فرایندهای اختلاط، برای طراحی بهینه و کارآمد سامانه‌های اختلاط حائز اهمیت است. این شناخت، علاوه بر بهبود فرایندهای شیمیایی، امکان بهره‌برداری بهینه را از منابع و مواد مورد استفاده نیز فراهم می‌آورد. به‌همین دلیل، مطالعه و تحقیق در مورد رفتار جریان متلاطم در تانک‌های همزن دار یک موضوع بسیار مهم در مهندسی شیمی محسوب می‌شود.

در گذشته، مطالعه جریان متلاطم در تانک‌های همزن دار اغلب به‌صورت تجربی انجام می‌شد، اما در حال حاضر دینامیک سیالات محاسباتی^۱ یک ابزار قدرتمند برای بررسی رفتار جریان در سامانه‌های مختلف است. استفاده از روش‌های محاسباتی در بسیاری از مسائل، آرمانی به‌نظر می‌رسد، زیرا در مواردی که به‌دست آوردن داده‌های تجربی از نظر اقتصادی مقرون به‌صرفه نیست، امکان ارائه اطلاعات دقیق را درباره جزئیات رفتار جریان فراهم می‌کند [۵].

هدف از این مقاله، بررسی و مقایسه مدل‌های مختلف استفاده شده در روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ^۲ (LES) جریان متلاطم داخل تانک همزن دار شامل: مدل‌های متداولی چون اسمگورینسکی^۳ استاندارد، اسمگورینسکی- لیلی^۴ و اسمگورینسکی دینامیکی و مدل‌های خاص مانند گران روی گردابه‌ای موضعی سازگار با دیواره^۵ و

مدل مقیاس تطبیقی^۶ است. این بررسی به ارزیابی دقت مدل‌های مختلف در پیش‌بینی رفتار جریان متلاطم داخل تانک همزن دار و شناسایی نقاط قوت و ضعف هر مدل می‌پردازد.

۲. شبیه‌سازی عددی جریان متلاطم

جریان‌های متلاطم از ساختارهای گردابه‌ای با طیف وسیعی از مقیاس‌های طولی و زمانی تشکیل شده‌اند که با یکدیگر تعامل دارند و انرژی را مبادله می‌کنند. بزرگترین مقیاس‌ها حاوی بیشترین انرژی هستند. در جریان‌های متلاطم، ساختارهای بزرگتر به ساختارهای کوچکتر تقسیم می‌شوند و انرژی خود را به مقیاس‌های کوچکتر منتقل می‌کنند. مدل‌سازی و شبیه‌سازی جریان متلاطم یکی از مهم‌ترین جنبه‌های دینامیک سیالات محاسباتی است. بررسی عددی جریان‌های متلاطم، معمولاً با استفاده از سه روش شبیه‌سازی عددی مستقیم^۷ (DNS)، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس^۸ (RANS) انجام می‌شود [۶].

در روش شبیه‌سازی عددی مستقیم، تمام ساختارهای جریان متلاطم حل می‌شوند. بنابراین، معادلات حاکم بر حرکت سیال باید به‌صورت دقیق و بدون اعمال مدل حل شوند. این روش، دقیق‌ترین روش عددی بررسی جریان‌های متلاطم است، اما هزینه و حجم محاسباتی بالایی دارد.

در روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس، مشخصه‌های جریان به دو بخش متوسط و اغتشاشات تقسیم می‌شود. مشخصه‌های تجزیه‌شده در معادلات جای‌گذاری می‌شود و از معادلات متوسط زمانی گرفته می‌شود. از حل معادلات حاصل مقدار متوسط مشخصه‌های جریان به‌دست می‌آید، در حالی که اثر اغتشاشات مدل می‌شود. این روش، دقت و هزینه محاسباتی کمتری نسبت به روش شبیه‌سازی عددی مستقیم و شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ دارد.

در روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، ساختارهای جریان متلاطم با اعمال یک فیلتر پایین‌گذر^۹ به دو بخش ساختارهای بزرگ و

1. Computational Fluid Dynamics (CFD)
2. Large eddy Simulation (LES)
3. Smagorinsky
4. Lilly
5. Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity

6. Scale-Adaptive Simulation (SAS)
7. Direct numerical Simulation (DNS)
8. Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)
9. Low pass

تیزبرش^۵ اشاره کرد. با اعمال فیلتر بر روی معادلات نویر- استوکس معادلات روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (4)$$

که \bar{u} و \bar{P} به ترتیب سرعت و فشار فیلتر شده هستند، ρ و ν چگالی و گرانروی دینامیکی سیال هستند و τ_{ij} تنسور تنش زیرشبکه است که به صورت زیر بیان می‌شود [۹]:

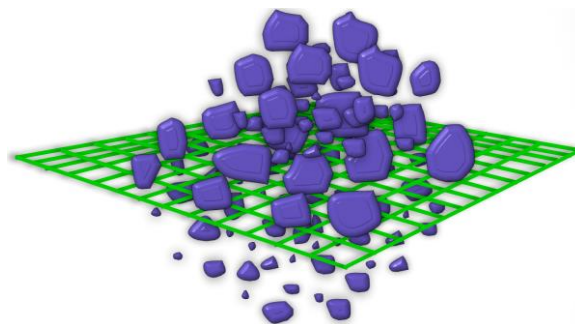
$$\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (5)$$

برای محاسبه تنسور تنش زیرشبکه به اطلاعات ساختارهای زیرشبکه احتیاج است که با توجه به این که در روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ این ساختارها با اعمال فیلتر حذف می‌شوند، نمی‌توان تنسور تنش را از نتایج حل معادلات (۳) و (۴) حساب کرد؛ بلکه لازم است که از یک مدل ریاضی- که بتواند رفتار فیزیکی ساختارهای زیرشبکه را به خوبی بیان کند- برای بیان تنش زیرشبکه استفاده کرد. تاکنون مدل‌های مختلفی برای این منظور ارائه شده است که از مهم‌ترین آن‌ها می‌توان به مدل‌های گرانروی گردابه‌ای^۶ اشاره کرد. این مدل‌ها، اغلب از فرضیه بوزینسک^۷ پیروی می‌کنند. بر این اساس، تنش زیرشبکه یک ارتباط خطی با تنسور نرخ کرنش دارد و از این رو، تنش زیرشبکه به گرادیان سرعت فیلتر شده مرتبط می‌شود. به طور کلی، مدل‌های تنش زیرشبکه بر اساس گرانروی گردابه‌ای به صورت زیر نشان داده می‌شوند [۱۰، ۱۱]:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = -2\nu_t \bar{S}_{ij} \quad (6)$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (7)$$

ساختارهای کوچک یا زیرشبکه^۱ تقسیم می‌شوند. ساختارهای بزرگ با استفاده از معادلات حاکم بر جریان حل می‌شوند، در حالی که اثر ساختارهای کوچک مدل می‌شود. شکل (۱) جداسازی ساختارهای مختلف جریان متلاطم یک سیال را با استفاده از یک شبکه محاسباتی نشان می‌دهد.



شکل ۱. جداسازی ساختارهای جریان متلاطم با استفاده از شبکه محاسباتی [۷].

Figure 1. Separation of turbulent flow structures using computational grid [7].

۳. معادلات حاکم بر روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ

در روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ با اعمال یک فیلتر پایین‌گذر بر روی معادلات نویر- استوکس ساختارهای بزرگ و کوچک جریان از هم جدا می‌شوند. از نظر ریاضی، اعمال فیلتر معادل با ضرب همگشت^۲ تابع فیلتر (G) در یک متغیر دلخواه جریان (f) است و طبق رابطه (۱) بیان می‌شود [۸]:

$$\bar{f}(x, t) = \int G(r, t) f(x - r, t) dr \quad (1)$$

که \bar{f} متغیر فیلتر شده است و متغیر زیرشبکه (f') با رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$f'(x, t) = f(x, t) - \bar{f}(x, t) \quad (2)$$

از متداول‌ترین فیلترهایی که در روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ استفاده می‌شود، می‌توان به فیلتر جعبه‌ای^۳، فیلتر گاوسین^۴ و فیلتر

1. Subgrid
2. Convolution
3. Box
4. Gaussian

5. Sharp Cutoff
6. Eddy Viscosity
7. Boussinesq

که در آن δ_{ij} و δ_{ij}^* به ترتیب بیانگر تابع دلتا دیراک^۱ و تنسور نرخ کرنش براساس سرعت فیلترشده هستند و v_t گرانروی گردابه‌ای است که باید مدل شود. بخش ایزوتروپیک تنسور تنش زیرشبکه است که معمولاً مدل نمی‌شود، بلکه به عبارت فشار استاتیک فیلترشده اضافه می‌شود. در سال‌های اخیر، مدل‌های مختلفی برای محاسبه گرانروی گردابه‌ای برای انواع هندسه‌ها بررسی شده است. مدل اسمگورینسکی متداول‌ترین مدل گرانروی گردابه‌ای است که اولین بار در سال ۱۹۶۳ برای شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ جریان‌های جوی از طرف اسمگورینسکی پیشنهاد شد [۱۲]. در این مدل v_t با مربع عرض فیلتر و اندازه تنسور نرخ کرنش متناسب است. با این فرض، گرانروی گردابه‌ای از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$v_t = C_s \Delta^2 |\mathcal{S}| \quad (8)$$

$$|\mathcal{S}| = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (9)$$

که در آن C_s ، Δ و $|\mathcal{S}|$ به ترتیب ضریب اسمگورینسکی، عرض فیلتر و اندازه تنسور نرخ کرنش هستند. در مدل اولیه که به نام مدل اسمگورینسکی استاندارد شناخته می‌شود، ضریب C_s ثابت است، اما در مدل اسمگورینسکی دینامیک ضریب C_s با زمان و مکان تغییر می‌کند.

۴. شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ جریان تانک همزن‌دار

اولین مطالعه شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ برای مخازن همزن‌دار از طرف اگلز [۱۳] با استفاده از روش شبکه بولتزمن انجام شد. او در مطالعه خود، یک تانک همزن‌دار مجهز به بافل را با استفاده از مدل اسمگورینسکی استاندارد با ضریب اسمگورینسکی ۰/۱۰ بررسی کرد و نشان داد که نتایج حاصل از این مدل با داده‌های تجربی مطابقت نسبتاً خوبی دارد. کرسبام^۲ و همکاران [۱۴] از روشی مشابه برای بررسی اثر دور همزن و گرانروی سیال بر عملکرد تانک همزن‌دار استفاده کردند. مشاهده شد که نتایج به دست آمده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، توان مورد نیاز همزن را به خوبی پیش‌بینی

می‌کند اما میدان جریان نسبت به مقادیر تجربی خطای زیادی دارد. لو^۴ و همکاران [۱۵]، با استفاده از روش شبکه غیریکنواخت بولتزمن^۵ [۱۶] جریان متلاطم درون یک مخزن مجهز به همزن راشتون را بررسی کردند. آن‌ها نتایج حاصل برای میدان جریان را با نتایج تجربی و نتایج شبیه‌سازی اگلز مقایسه کردند و نشان دادند که نتایج از دقت خوبی برخوردار است. بنابراین، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ با استفاده از روش شبکه بولتزمن نتایج قابل قبولی ارائه می‌دهد. شبیه‌سازی‌های گردابه‌های بزرگ جریان متلاطم در تانک همزن‌دار مجهز به بافل و همزن راشتون با حل معادلات نویر-استوکس و استفاده از مدل اسمگورینسکی استاندارد به دست پژوهشگران مختلف بررسی شد [۲۲-۱۷]. بررسی این پژوهش‌ها نشان داد که شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ یک روش قابل اطمینان برای بررسی رفتار جریان در هندسه‌های پیچیده نظیر تانک همزن‌دار است. شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ رفتار کلی جریان و تغییرات زمانی مشخصه‌های جریان را به خوبی پیش‌بینی می‌کند و از این نظر، نسبت به روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر-استوکس بهتر عمل می‌کند [۲۳]. اما مدل‌های ساده شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ نظیر مدل اسمگورینسکی استاندارد در پیش‌بینی رفتار جریان در برخی نقاط به ویژه در نزدیکی همزن دارای خطا است و انتظار می‌رود که استفاده از روش‌های دقیق‌تر این خطا را کاهش دهد.

در کسن^۶ و ون دن آکر^۷ [۲۴] الگوریتمی دقیق‌تر برای توصیف حرکت همزن در جریان تانک همزن‌دار مجهز به بافل که به وسیله توربین راشتون هدایت می‌شود، معرفی کردند. از مدل مقیاس زیرشبکه اسمگورینسکی استاندارد با ضریب ثابت ۰/۱۲ استفاده و نتایج میدان سرعت و انرژی جنبشی تلاطم به خوبی پیش‌بینی شد. در مطالعه‌ای دیگر در کسن و همکاران [۲۵] جریان متلاطم در یک کریستالایزر صنعتی مجهز به همزن راشتون را با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ در اعداد رینولدز مختلف بررسی کردند. علاوه بر این، فرایند اختلاط در مخزن با استفاده از ردیابی ذرات ارزیابی و مشاهده شد که نتایج شبیه‌سازی جریان داخل تانک در اعداد رینولدز کم از دقت خوبی برخوردار است.

باکر^۸ و همکاران [۲۶] از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ برای

4. Lu
5. Boltzmann
6. Derksen
7. Van den Akker
8. Bakker

1. Dirac Delta Function
2. Eggels
3. Kersebaum

شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ حساب‌کردند. مدل اسم‌گورینسکی استاندارد برای مدل‌سازی مقیاس‌های زیرشبکه استفاده‌شد. پیش‌بینی‌های عددی با نتایج مقالات و هم‌چنین با داده‌های اندازه‌گیری‌شده با سرعت‌سنج تصویر ذرات، مقایسه و توافق بسیار خوبی مشاهده‌شد. زمان‌خان^۹ و همکاران [۳۵] با استفاده از روش شبیه‌سازی‌های گردابه‌های بزرگ، جریان متلاطم درون یک مخزن اختلاط جامد-مایع مجهز به بافل را بررسی کردند.

زادغفاری^{۱۰} و همکاران [۳۶] با استفاده از روش شبیه‌سازی‌های گردابه‌های بزرگ، جریان متلاطم درون یک مخزن همزن‌دار بافل‌دار استاندارد مجهز به همزن توربینی راشتون شش‌پره را شبیه‌سازی کردند. از روش مش دورانی وابسته به زمان برای محاسبات میدان جریان استفاده‌شد. در شکل (۲) تغییرات انرژی جنبشی تلاطم برحسب شعاع با داده‌های تجربی وو^{۱۱} و پترسون^{۱۲} [۳۷] مقایسه‌شده‌است. نتایج شبیه‌سازی و تجربی از نظر رفتار کیفی، به‌خوبی با یکدیگر همخوانی دارد؛ اما مقادیر عددی خطای زیادی دارد که نشان‌دهنده آن است که احتمالاً مدل‌های پیچیده‌تر روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ باید برای پیش‌بینی دقیق‌تر مشخصه‌های جریان استفاده‌شود.

ژانگ^{۱۳} و همکاران [۳۸] روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ را بر پایه مدل اوپلر- اوپلر برای پیش‌بینی زمان اختلاط گاز- مایع در یک تانک همزن‌دار مجهز به همزن توربینی راشتون ارائه کردند. آن‌ها هم‌چنین آزمایش‌هایی برای تأیید نتایج شبیه‌سازی انجام دادند و از مدل مقیاس زیرشبکه اسم‌گورینسکی با ضریب ۰/۲ برای مدل‌سازی اثر مقیاس زیرشبکه استفاده کردند. این تحقیق نشان داد که با افزایش سرعت همزن، زمان اختلاط کاهش می‌یابد، اما با افزایش کاهش می‌یابد. به‌طور کلی، نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی مطابقت خوبی داشت و نشان داد که این روش می‌تواند به‌طور دقیق ویژگی‌های اختلاط در یک تانک همزن‌دار گاز- مایع را شبیه‌سازی کند.

بررسی ساختارهای متلاطم در تانک همزن‌دار استفاده کردند. آن‌ها متداول‌ترین همزن‌ها از جمله: همزن جریان شعاعی و محوری، همزن‌های هیدروفویل متعدد و همزن منحنی شکل را بررسی کردند. حرکت همزن با مدل مش دورانی مدل‌سازی‌شد. در مقاله دیگر باکر و اوشینوو^۱ [۲۷]، تأثیر هندسه مخزن و همزن و هم‌چنین، مشخصه‌های عملیاتی مانند سرعت همزن و گران‌روی سیال را بررسی کردند. نتایج نشان داد که شبیه‌سازی میدان‌های جریان در مخزن‌های همزن‌دار با داده‌های سرعت سنج تصویر ذرات گزارش‌شده در مقالات، مطابقت دارد.

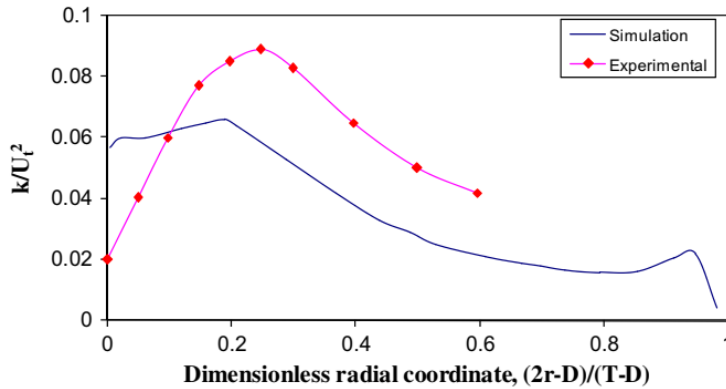
یه‌اوه^۲ و همکاران [۲۸،۲۹] پیش‌بینی‌های عددی را برای جریان در یک تانک مجهز به همزن راشتون با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس انجام دادند. مشاهده شد که روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ دقت بیشتری نسبت به روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس دارد. هم‌چنین، آن‌ها در مطالعه دیگری [۳۰]، فرایند اختلاط را در یک مخزن همزن‌دار با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ بررسی و زمان اختلاط را مطالعه کردند و نشان دادند که این روش توانایی زیادی برای پیش‌بینی دقیق ویژگی‌های اختلاط دارد که می‌تواند در بهینه‌سازی طراحی مخازن صنعتی مؤثر باشد.

مین^۳ و جاو^۴ [۳۱] جریان متلاطم ایجادشده در یک مخزن مجهز به همزن هیدروفویل سه‌تیغه باریک را دوی^۵ و کومار^۶ [۳۲] مخزن بافل‌دار مجهز به همزن منحنی شکل را و جانیکا^۷ [۳۳] مخزن مجهز به همزن استاندارد را با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ با مدل زیرشبکه اسم‌گورینسکی- لیلی بررسی کردند. چرخش همزن با استفاده از روش مش دورانی مدل‌سازی‌شد. در نهایت، توافق خوبی بین نتایج آزمایشگاهی و نتایج حاصل از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ به دست آمد.

آلکامو^۸ و همکاران [۳۴] جریان متلاطم تولیدشده در یک مخزن همزن‌دار بدون بافل مجهز به همزن توربینی راشتون را با روش

1. Oshinowo
2. Yeoh
3. Min
4. Gao
5. Devi
6. Kumar
7. Janiga
8. Alcamo

9. Zamankhan
10. Zadghaffari
11. Wu
12. Patterson
13. Zhang



شکل ۲. مقایسه تغییرات شعاعی انرژی جنبشی تلاطم در مرکز همزن با داده‌های تجربی [۳۶].

Figure 2. Comparison of predicted radial profile of turbulent kinetic energy dissipation rate at impeller center line with experimental data [36].

سه عدد رینولدز مختلف با هدف مشاهده اثر عدد رینولدز بر میدان جریان ارائه کردند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان داد که با افزایش عدد رینولدز تغییر ساختار گردابه‌ها سریع‌تر می‌شود.

جاهدا^۴ و همکاران [۴۴] از یک ضریب گران‌روی دینامیکی در محاسبات روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ برای پیش‌بینی همگن‌سازی مایعات در تانک‌های همزن‌دار استفاده کردند. آن‌ها تانک‌هایی را که با یک یا چند همزن عمل می‌کردند، ارزیابی کردند. همچنین، دو نوع همزن توربینی راشتون با تیغه‌های صاف و توربینی با تیغه‌هایی با زاویه ۴۵ درجه را بررسی کردند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی موجود در مقالات مقایسه شد. سپس، تأثیر تعداد و نحوه ترکیب همزن‌ها بر همگن‌سازی مایعات، بررسی شد و در نهایت، نتایج نشان داد که روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، با وجود طولانی‌بودن زمان محاسبات، تطابق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد.

روش اسمگورینسکی استاندارد یک روش اتلافی است و علاوه بر این، ثابت در نظر گرفتن C_s در کل دامنه جریان باعث بی‌دقتی این مدل-به‌خصوص در پیش‌بینی دنباله‌های اطراف پره‌های همزن-می‌شود. استفاده از روش اسمگورینسکی دینامیکی باعث بهبود قابل ملاحظه‌ای در پیش‌بینی رفتار جریان نسبت به روش اسمگورینسکی استاندارد می‌شود. در روش اسمگورینسکی دینامیکی ضریب C_s براساس ویژگی‌های جریان تغییر می‌کند و به‌ویژه، در نزدیکی همزن که رفتار جریان پیچیده‌تر است تصویر بهتری از میدان جریان ارائه می‌کند. علاوه بر این، تغییر ضریب

مینگ^۱ و همکاران [۳۹] اثر کاربرد همزن را با چند محور بر زمان اختلاط و میدان جریان با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و روش تجربی بررسی کردند.

در مدل اسمگورینسکی استاندارد، ثابت در نظر گرفتن ضریب C_s باعث بی‌دقتی در پیش‌بینی میدان‌های جریان متلاطم در شرایط مختلف-مانند نزدیکی دیوارهای جامد یا رژیم‌های انتقالی-می‌شود [۴۰]. برای حل این مشکلات، جرمونو^۲ و همکاران [۴۱] از یک ضریب متغیر به جای ضریب ثابت اسمگورینسکی استفاده کردند. این مدل، براساس رابطه جبری بین تنش‌های مقیاس زیرشبکه در دو سطح فیلتر مختلف و تنش‌های آشفته حل شده، بیان می‌شود. نتایج این مدل نشان می‌دهد که تنش‌های مقیاس زیرشبکه در ناحیه نزدیک دیواره‌ها در جریان آرام ناپدید می‌شوند و رفتار مجانبی صحیحی در این ناحیه دارند. این مدل، با استفاده از داده‌های شبیه‌سازی عددی مستقیم با جریان متلاطم داخل کانال مطابقت خوبی دارد.

یون^۳ و همکاران [۴۲] شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ جریان در تانک همزن‌دار را بررسی کردند. آن‌ها از مدل اسمگورینسکی دینامیکی برای مدل‌سازی مقیاس‌های زیرشبکه استفاده کردند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های حاصل از سرعت‌سنج تصویر ذرات مقایسه و مشاهده شد که نتایج محاسباتی با اندازه‌گیری‌های تجربی تطابق خوبی دارد. در مطالعه دیگر، یون و همکاران [۴۳] شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ جریان در یک تانک همزن‌دار بدون بافل را برای

1. Meng
2. Germano
3. Yoon

4. Jahoda

رامیز- کروز^۴ و همکاران [۴۷] در مطالعه خود از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ برای حل جریان سطح آزاد در یک مخزن مجهز به همزن توربینی راشتون استفاده کردند. نتایج درمقایسه با مطالعات تجربی قبلی مطابقت خوبی نشان داد.

ریو^۵ و همکاران [۴۸] شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ جریان درون یک تانک مجهز به همزن توربینی راشتون و بافل را ارائه کردند. آن‌ها از مدل مقیاس تطبیقی برای شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ استفاده کردند و نتایج را با روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس ناپایا مقایسه کردند. نتایج نشان داد که افزایش دقت در شبکه محاسباتی با استفاده از مدل مقیاس تطبیقی، عملکرد بهتری نسبت به روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس ناپایا دارد. تغییرات مؤلفه‌های سرعت در جهت محوری و شعاعی در شکل (۳) درمقایسه با داده‌های تجربی مونتانت^۶ و همکاران [۴۹] ارائه شده است. شبیه‌سازی مقیاس تطبیقی نسبت به داده‌های تجربی درمقایسه با نتایج روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس ناپایا انحراف قابل توجهی دارد. به‌طور کلی، نتایج روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس ناپایا به‌خوبی با داده‌های تجربی مطابقت دارد.

گو^۷ و همکاران [۵۰] از روش شبیه‌سازی گردابه جداسده^۸ برای تعیین طراحی بهینه پره‌های همزن برای بهبود فرایند اختلاط سیال در یک تانک همزن‌دار استفاده کردند. روش شبیه‌سازی گردابه جداسده از مدل‌های روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر- استوکس است که در مناطقی که شبکه به‌اندازه کافی برای کاربرد روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، ریز است؛ به فرمول مقیاس زیر شبکه تغییر می‌کند. مقایسه نتایج با داده‌های تجربی نشان داد که مدل از دقت نسبتاً خوبی برخوردار است. هرچند که در برخی شرایط مثلاً در اعداد رینولدز بالا اختلاف با نتایج تجربی بیشتر می‌شود.

اسماگورینسکی در قسمت‌های مختلف فضای محاسباتی امکان شبیه‌سازی دقیق‌تر جریان را در نزدیکی دیواره فراهم می‌کند، اما با وجود این که روش اسماگورینسکی دینامیکی باعث افزایش دقت نتایج شبیه‌سازی نسبت به روش اسماگورینسکی استاندارد می‌شود؛ هم‌چنان نسبت به نتایج تجربی دارای خطا است و انتظار می‌رود که با کاربرد مدل‌های دقیق‌تر بتوان از میزان خطا کاست.

لامارک^۱ و همکاران [۴۵] شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ جریان متلاطم در یک تانک همزن‌دار را بررسی کردند. به‌دلیل محدودیت‌های وسیع مدل اسماگورینسکی استاندارد و دینامیکی، آن‌ها گرانروی گردابه‌ای را با استفاده از روش گرانروی گردابه‌ای موضعی سازگار با دیواره مدل‌سازی کردند. در نهایت، مقایسه نتایج شبیه‌سازی شده تطابق خوبی با نتایج تجربی و آزمایشگاهی سرعت‌سنج لیزر داپلر نشان داد. در این روش، گرانروی گردابه‌ای به‌صورت معادله (۱۰) تعریف می‌شود.

$$v_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\bar{s}_{ij} s_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (10)$$

که در آن C_w ثابت و برابر با ۰/۵ و S^d تنسور براساس مربع گرادیان سرعت است.

مالیک^۲ و همکاران [۴۶] در مطالعه خود، از مدل اسماگورینسکی بهبودیافته برشی^۳ به‌همراه روش‌های سرعت‌سنجی تصویر ذرات، برای توصیف میدان جریان در مخزن همزن‌دار استاندارد مجهز به همزن توربینی راشتون استفاده کردند. مدل اسماگورینسکی بهبودیافته برشی پیشنهادی قادر به پیش‌بینی دقیق ناحیه متلاطم نزدیک دیواره، بدون نیاز به تابع دیواره است. به‌طور کلی، محاسبات با استفاده از این مدل به‌صورت کارآمدتر انجام می‌شود. این مدل، هم‌چنین دارای قابلیت تعمیم به جریان‌های متلاطم پیچیده و ناهمگن یکنواخت است؛ بدین معنا که می‌تواند در شرایط واقعی و پیچیده‌تر نیز به‌خوبی عمل کند. مدل اسماگورینسکی بهبودیافته برشی مانند مدل اسماگورینسکی استاندارد است با این تفاوت که گرانروی گردابه‌ای به‌صورت معادله (۱۱) بیان می‌شود.

$$v_t = C_s \Delta^2 (|\tilde{S}| - |\overline{S}|) \quad (11)$$

4. Ramirez-Cruz

5. Rave

6. Montante

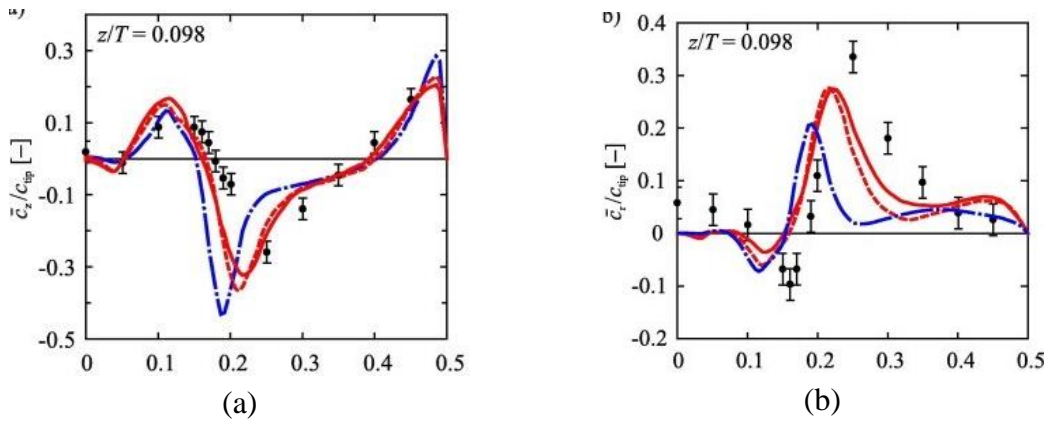
7. Gu

8. Detached Eddy Simulation

1. Lamarque

2. Mallik

3. Shear Improved Smagorinsky Model



شکل ۳. پروفایل‌های سرعت میانگین زمانی برای (a) سرعت محوری، (b) سرعت شعاعی برای مدل‌های متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر-استوکس ناپایدار (SST) و شبیه‌سازی مقیاس تطبیقی متلاطم (SAS) (- و --) و داده‌های تجربی (*) [۴۸].
 Figure 3. Time-averaged radial profiles for CT15 of a) axial, b) radial for SST and SAS turbulence models and simplified infinitely thin blade geometry in comparison with measurement data [48].

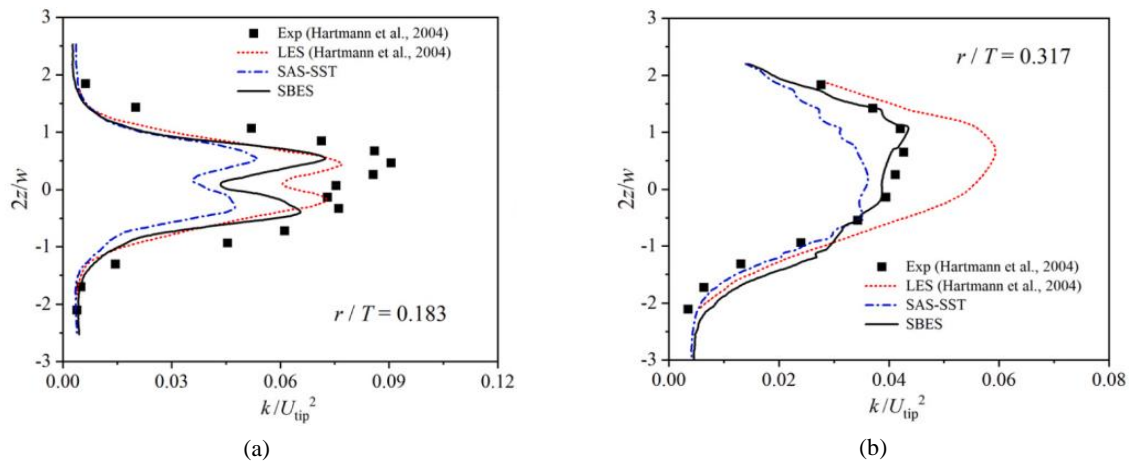
شبیه‌سازی کوچک است، افزایش شبکه محاسباتی می‌تواند دقت مدل شبیه‌سازی مقیاس تطبیقی را بهبود دهد.
 لی^۵ و همکاران [۵۳] نتایج حاصل از مدل‌های مختلف روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ را - شامل: اسماگورینسکی استاندارد، اسماگورینسکی دینامیکی، انرژی جنبشی دینامیک و گردابه موضعی سازگار با دیواره برای همزن توربینی راشتون و پره منحنی - با نتایج سرعت سنج تصویرذره مقایسه کردند. نتایج نشان داد که هریک از مدل‌ها در یک ناحیه خاص یا برای یک مشخصه نتایج قابل قبول ارائه می‌دهند، اما نمی‌توان یک مدل را معرفی کرد که در همه شرایط مناسب باشد.

برطرف کردن نقطه ضعف مدل‌های اسماگورینسکی استاندارد و اسماگورینسکی دینامیکی و استفاده از سایر مدل‌ها باعث افزایش دقت پیش‌بینی روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ شد. مقایسه نتایج مدل‌های مختلف ارائه شده در مقالات نشان می‌دهد که به‌طور کلی روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ نسبت به روش متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر-استوکس رفتار جریان داخل تانک را به‌ویژه در نزدیکی همزن بهتر پیش‌بینی می‌کند. از طرفی، استفاده از مدل‌های پیشرفته‌تر روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ نسبت به مدل‌های ساده‌تر نظیر اسماگورینسکی استاندارد باعث بهبود قابل ملاحظه‌ای در پیش‌بینی رفتار جریان می‌شود. با وجود این که روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، نتایج بهتری نسبت به روش

جیا^۱ و همکاران [۵۱] شبیه‌سازی گردابه تنش ترکیبی^۲ را - که ترکیبی از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر-استوکس است - برای بررسی جریان متلاطم تانک همزن دار مجهز به همزن توربینی راشتون ارائه کردند. در نهایت، با پیش‌بینی‌های عددی میدان جریان و ویژگی‌های تلاطم عملکرد روش شبیه‌سازی گردابه‌های تنش ترکیبی ارزیابی شد. نتایج این روش، با نتایج به‌دست آمده از مدل ترکیبی شبیه‌سازی تطبیقی مقیاس و انتقال تنش برشی^۳ و همچنین، داده‌های تجربی هارتمن^۴ و همکاران [۵۲] مقایسه و مشاهده شد که مدل شبیه‌سازی گردابه تنش ترکیبی تطابق بسیار خوبی با داده‌های تجربی سرعت و انرژی جنبشی تلاطم دارد. علاوه بر این، مدل شبیه‌سازی گردابه تنش ترکیبی می‌تواند با موفقیت ویژگی‌های گردابه‌ها را ثبت کند و ساختار جریان متلاطم را نسبت به مدل ترکیبی شبیه‌سازی تطبیقی مقیاس و انتقال تنش برشی با شبکه‌های محاسباتی مناسب حل کند. با توجه به شکل (۴) نتایج شبیه‌سازی مقیاس تطبیقی با داده‌های تجربی مطابقت خوبی ندارد که این امر می‌تواند به علت انتخاب نامناسب شبکه محاسباتی باشد. با این حال، نتایج شبیه‌سازی گردابه تنش ترکیبی بهترین تطابق را با داده‌های تجربی نشان می‌دهد. بنابراین، شبکه محاسباتی انتخاب شده برای مدل شبیه‌سازی گردابه تنش ترکیبی مناسب است. از آنجایی که اندازه گام زمانی در این

1. Jia
2. Stressed-Blended Eddy Simulation
3. Shear Stress Transport
4. Hartman

5. Li



شکل ۴. میانگین پروفایل‌های محوری در موقعیت‌های شعاعی مختلف [۵۱].

Figure 4. Phase-averaged axial profiles at different radial positions [51].

مطالعات انجام‌شده، ثابت‌بودن ضریب اسماگورینسکی در مدل اسماگورینسکی استاندارد باعث نبود دقت بالا در پیش‌بینی گران‌روی گردابه‌ای نزدیکی مرزها می‌شود. بنابراین، برای رفع چنین مشکلی مدل اسماگورینسکی دینامیکی پیشنهاد شد. در مدل اسماگورینسکی دینامیکی ضریب اسماگورینسکی به‌صورت دینامیکی تغییر می‌کند که می‌تواند شرایط گران‌روی گردابه‌ای در ناحیه مرزها را به‌خوبی پیش‌بینی کند. با این حال، مدل اسماگورینسکی دینامیکی فقط برای هندسه‌هایی مناسب است که حداقل یک راستای همگن داشته باشند. به همین دلیل، پژوهشگران با بررسی بیشتر، مدل اسماگورینسکی بهبودیافته برشی را ارائه کردند و نشان دادند که نتایج مدل اسماگورینسکی بهبودیافته برشی بر مدل اسماگورینسکی دینامیکی از نظر هزینه محاسباتی ارجحیت دارد. به‌طور کلی، بررسی مقالات نشان داد که روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ برای شبیه‌سازی جریان در تانک همزن‌دار از دقت بسیار خوبی برخوردار است و نسبت به روش کم‌هزینه‌تر متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر-استوکس دقیق‌تر است. اگرچه، تاکنون محققان مدل‌های مختلفی را با دقت قابل قبول برای شبیه‌سازی جریان متلاطم با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ ارائه داده‌اند، به دلیل پیچیدگی و رفتار غیرقابل پیش‌بینی جریان متلاطم، تلاش برای رسیدن به یک مدل جامع با پایداری و دقت بیشتر هم‌چنان ادامه دارد.

متوسط‌گیری رینولدز معادلات نویر-استوکس ارائه می‌دهد، به‌علت هزینه محاسباتی بسیار بالای آن، این روش در مسائل واقعی مهندسی و شبیه‌سازی تانک‌های همزن‌دار مورد استفاده در صنعت، قابل استفاده نیست [۲۲].

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، مراجع و منابع در دسترس بررسی عددی جریان متلاطم درون تانک‌های همزن‌دار با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ مطالعه شد. مدل‌های شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ از نظر میزان پیچیدگی، سرعت، دقت و تناسب با جریان متلاطم ایجاد شده به‌وسیله همزن از نظر مقیاس‌های مکانی و زمانی، بررسی شدند. تاکنون جریان متلاطم درون تانک‌های همزن‌دار با استفاده از مدل‌های اسماگورینسکی استاندارد با در نظر گرفتن ضریب ثابت، اسماگورینسکی دینامیکی، اسماگورینسکی بهبودیافته برشی، مدل موضعی سازگار با دیواره و هم‌چنین، مدل‌های ترکیبی که می‌تواند ترکیبی از مدل‌های مختلف شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و هم‌چنین، ترکیبی از دو روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و متوسط‌گیری معادلات رینولدز نویر-استوکس باشد، انجام شده است. در برخی از مطالعات، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ با شبیه‌سازی عددی مستقیم و یا با نتایج آزمایشگاهی موجود مقایسه شد و در نهایت، دقت و سرعت مدل‌های بررسی شده ارزیابی شد. با توجه به

- [1] Ascanio, G. (2015). Mixing time in stirred vessels: A review of experimental techniques, *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 23(7), 1065–1076. doi:10.1016/j.cjche.2014.10.022
- [2] Chowpani, M., Gheibi, S., Taqvi, M. & Sadegh Moghads, J. (2009). Effect of impeller type on mixing time in stirred tanks, *Journal of Iranian Chemical Engineering*, 8(40), 60–65, [In Persian].
- [3] Abolqasmi, H., Zaheri, M., Qanadi Maragheh, M. & Zaheri, P. (2009). Investigation of the parameters affecting droplet size in stirred tanks, *Journal of Iranian Chemical Engineering*, 8(41), [In Persian].
- [4] Ahmadi, M. H., Sadegh Moghads, J. & Atai, E. (2020). Investigation of the operating conditions affecting the reactive mixing of acid-base in a stirred tank by PIV/PLIF laser method, *Journal of Iranian Chemical Engineering*, 19(110), 6–18, [In Persian].
- [5] Hewitt, G. F. & Vassilicos, J. C. (2005). *Prediction of Turbulent Flows*, 1st edition, Cambridge University Press, England.
- [6] Vuorinen, V. & Keskinen, K. (2016). DNSLab: A gateway to turbulent flow simulation in Matlab, *Computer Physics Communications*, 203, 278–289. doi:10.1016/j.cpc.2016.02.023
- [7] Azadani, L. N. & Staples, A. E. (2015). Large-eddy simulation of turbulent barotropic flows in spectral space on a sphere, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 72(5), 1727–1742. doi:10.1175/JAS-D-14-0183.1
- [8] Pope, S. B. (2000). *Turbulent flows*, 1st Edition, Cambridge University Press, England.
- [9] Leonard, A. (1975). Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows, *Advances in Geophysics*, 18, 237–248. doi:10.1016/S0065-2687(08)60464-1
- [10] Clark, R. A., Ferziger, J. H. & Reynolds, W. C. (1979). Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow, *Journal of Fluid Mechanics*, 91(1), 1–16. doi:10.1017/S002211207900001X
- [11] Mahdizadeh Ghohe, F. & Azadani, L. N. (2023). Historical evolution of eddy viscosity models in large eddy simulation of turbulent flows, *Iranian Journal of Mechanical Engineering*, 32(3), 31–44. doi:10.30506/MMEP.2023.2007063.2097
- [12] Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment, *Monthly Weather Review*, 91(3), 99–164. doi:10.1126/science.12.306.731-a
- [13] Eggels, J. G. M. (1996). Direct and large-eddy simulation of turbulent fluid flow using the lattice-Boltzmann scheme, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 17(3), 307–323. doi:10.1016/0142-727X(96)00044-6
- [14] Kersebaum, J., Fleischlen, S., Hofinger, J. & Wehinger, G. D. (2024). Simulating Stirred Tank Reactor Characteristics with a Lattice Boltzmann CFD Code, *Chemical Engineering and Technology*, 47(3), 586–595. doi:10.1002/ceat.202300384
- [15] Lu, Z., Liao, Y., Qian, D., McLaughlin, J. B., Derksen, J. J. & Kontomaris, K. (2002). Large eddy simulations of a stirred tank using the lattice Boltzmann method on a nonuniform grid, *Journal of Computational Physics*, 181(2), 675–704. doi:10.1006/jcph.2002.7151
- [16] He, X., Luo, L. S. & Dembo, M. (1996). Some progress in lattice Boltzmann method. Part I. Nonuniform mesh grids, *Journal of Computational Physics*, 129(2), 357–363. doi:10.1006/jcph.1996.0255
- [17] Revstedt, J., Fuchs, L. & Trägårdh, C. (1998). Large eddy simulations of the turbulent flow in a stirred reactor, *Chemical Engineering Science*, 53(24), 4041–4053. doi:10.1016/S0009-2509(98)00203-6
- [18] Zhang, Y., Yang, C. & Mao, Z. (2006). Large eddy simulation of liquid flow in a stirred tank with improved inner-outer iterative algorithm, *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 14(3), 321–329. doi:10.1016/S1004-9541(06)60078-5
- [19] Fan, J. Y., Wang & W. F. (2007). Large Eddy Simulations of Flow Instabilities in a Stirred Tank Generated by a Rushton Turbine, *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 15(2), 200–208. doi.org/10.1016/S1004-9541(07)60059-7
- [20] Zamankhan, P. (2010). Large eddy simulation and PIV experiments of air-water mixing tanks, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 15(6), 1511–1525. doi:10.1016/j.cnsns.2009.06.021
- [21] Li, Z., Hu, M., Bao, Y. & Gao, Z. (2012). Particle image velocimetry experiments and large eddy simulations of merging flow characteristics in dual Rushton turbine stirred tanks, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 51(5), 2438–2450. doi:10.1021/ie201579t
- [22] Giacomelli, J. J. & Van den Akker, H. E. A. (2020). Time Scales and Turbulent Spectra above the Base of Stirred Vessels from Large Eddy Simulations, *Flow, Turbulence and Combustion*, 105(1), 31–62. doi:10.1007/s10494-019-00095-z
- [23] Delafosse, A., Morchain, J., Guiraud, P. & Liné, A. (2009). Trailing vortices generated by a Rushton turbine: Assessment of URANS and large Eddy simulations, *Chemical Engineering Research and Design*, 87(4), 401–411. doi:10.1016/j.cherd.2008.12.018
- [24] Derksen, J. & Van Den Akker, H. E. A. (1999). Fluid Mechanics and Transport Phenomena Large Eddy

- Simulations on the Flow Driven by a Rushton Turbine, *Fluid Mechanics and Transport Phenomena*, 45(2), 209–221. doi: 10.1002/aic.690450202
- [25] Derksen, J. J., Kontomaris, K., McLaughlin, J. B. & Van den Akker, H. E. A. (2007). Large-eddy simulations of single-phase flow dynamics and mixing in an industrial crystallizer, *Chemical Engineering Research and Design*, 85(2), 169–179. doi:10.1205/cherd06025
- [26] Bakker, A., Oshinowo, L. M. & Marshall, E. M. (2000). The Use of Large Eddy Simulation to Study Stirred Vessel Hydrodynamics, *10th European Conference of Mixing*, 247–254
- [27] Bakker, A. & Oshinowo, L. M. (2004). Modelling of turbulence in Stirred Vessels using Large Eddy Simulation, *Chemical Engineering Research and Design*, 82, 1169–1178. doi:10.1205/cerd.82.9.1169.44153
- [28] Yeoh, S. L., Papadakis, G. & Yianneskis, M. (2004). Numerical simulation of turbulent flow characteristics in a stirred vessel using the LES and RANS approaches with the sliding/deforming mesh methodology, *Chemical Engineering Research and Design*, 82(7), 834–848. doi:10.1205/0263876041596751
- [29] Yeoh, S. L., Papadakis, G., Lee, K. C. & Yianneskis, M. (2004). Large Eddy Simulation of turbulent flow in a Rushton impeller stirred reactor with sliding-deforming mesh methodology, *Chemical Engineering and Technology*, 27(3), 257–263. doi:10.1002/ceat.200401994
- [30] Yeoh, S. L., Papadakis, G. & Yianneskis, M. (2005). Determination of mixing time and degree of homogeneity in stirred vessels with large eddy simulation, *Chemical Engineering Science*, 60(8-9), 2293–2302. doi:10.1016/j.ces.2004.10.048
- [31] Min, J. & Gao, Z. (2006). Large eddy simulations of mixing time in a stirred tank, *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 14(1), 1–7. doi:10.1016/S1004-9541(06)60030-X
- [32] Devi, T. T. & Kumar, B. (2015). Large-Eddy Simulation of Turbulent Flow in Stirred Tank with a Curved Blade Impeller, *Journal of Engineering Thermophysics*, 24(2), 152–168. doi:10.1134/S181023281502006X
- [33] Janiga, G. (2019). Large-eddy simulation and 3D proper orthogonal decomposition of the hydrodynamics in a stirred tank, *Chemical Engineering Science*, 201, 132–144. doi:10.1016/j.ces.2019.01.058
- [34] Alcamo, R., Micale, G., Grisafi, F., Brucato, A. & Ciofalo, M. (2005). Large-eddy simulation of turbulent flow in an unbaffled stirred tank driven by a Rushton turbine, *Chemical Engineering Science*, 60(8-9), 2303–2316. doi:10.1016/j.ces.2004.11.017
- [35] Zamankhan, P., Huang, J. & Mousavi, S. M. (2007). Large eddy simulations of a brine-mixing tank, *Journal of Offshore Mechanics and Arctic Engineering*, 129(3), 176–187. doi:10.1115/1.2426995
- [36] Zadghaffari, R., Moghaddas, J. S. & Revstedt, J. (2010). Large-eddy simulation of turbulent flow in a stirred tank driven by a Rushton turbine, *Computers and Fluids*, 39(7), 1183–1190. doi:10.1016/j.compfluid.2010.03.001
- [37] Wu, H. & Patterson, G. K. (1989). Laser-Doppler measurements of turbulent-flow parameters in a stirred mixer, *Chemical Engineering Science*, 44(10), 2207–2221. doi:10.1016/0009-2509(89)85155-3
- [38] Zhang, Q., Yang, C., Mao, Z. S. & Mu, J. (2012). Large eddy simulation of turbulent flow and mixing time in a gas-liquid stirred tank, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 51(30), 10124–10131. doi:10.1021/ie202447n
- [39] Meng, T., Wang, Y., Wang, S., Qin, S., Zhang, Q., Wang, Y., Tao, C., Xu, Y. & Liu, Z. (2024). Exploration of Multishafts Stirred Reactors: An Investigation on Experiments and Large Eddy Simulations for Turbulent Chaos and Mixing Characteristics, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 63(5), 2441–2456. doi:10.1021/acs.iecr.3c04042
- [40] Schumann, U. (1975). Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli, *Journal of Computational Physics*, 18(4), 376–404. doi:10.1016/0021-9991(75)90093-5
- [41] Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. & Cabot, W. H. (1991). A dynamic subgridscale eddy viscosity model A dynamic subgrid-scale eddy viscosity, *Physics of Fluids*, 3, 1760–1765. doi:10.1063/1.857955
- [42] Yoon, H. S., Balachandra, S., Ha, M. Y. & Kar, K. (2003). Large Eddy Simulation of Flow in a Stirred Tank, *Fluids Engineering*, 125(3), 486–499. doi:10.1115/1.1566046
- [43] Yoon, H. S., Balachandar, S. & Ha, M. Y. (2009). Large eddy simulation of flow in an unbaffled stirred tank for different Reynolds numbers, *Physics of Fluids*, 21, 085102. doi:10.1063/1.3210776
- [44] Jahoda, M., Mostek, M., Kukukova, A. & Machon, V. (2007). CFD Modelling of Liquid Homogenization in Stirred Tanks With One and Two Impellers Using Large Eddy Simulation, *Chemical Engineering Research and Design*, 85(5), 616–625. doi:10.1205/cherd06183
- [45] Lamarque, N., Zoppé, B., Lebaigue, O., Dolias, Y., Bertrand, M. & Ducros, F. (2010). Large-eddy simulation of the turbulent free-surface flow in an unbaffled stirred tank reactor, *Chemical Engineering*

- Science*, 65(15), 4307–4322. doi:10.1016/j.ces.2010.03.014
- [46] Malik, S., Lévêque, E., Bouaifi, M., Gamet, L., Flottes, E., Simoëns, S. & El-Hajem, M. (2016). Shear improved Smagorinsky model for large eddy simulation of flow in a stirred tank with a Rushton disk turbine, *Chemical Engineering Research and Design*, 108, 69–80. doi:10.1016/j.cherd.2016.02.035
- [47] Ramírez-Cruz, J., Salinas-Vázquez, M., Ascanio, G., Vicente-Rodríguez, W. & Lagarza-Córtés, C. (2020). Mixing dynamics in an uncovered unbaffled stirred tank using Large-Eddy Simulations and a passive scalar transport equation, *Chemical Engineering Science*, 222, 115658. doi:10.1016/j.ces.2020.115658
- [48] Rave, K., Lehmenkühler, M., Wirz, D., Bart, H. J. & Skoda, R. (2021). 3D flow simulation of a baffled stirred tank for an assessment of geometry simplifications and a scale-adaptive turbulence model, *Chemical Engineering Science*. 231, 116262. doi:10.1016/j.ces.2020.116262
- [49] Montante, G., Lee, K. C., Brucato, A. & Yianneskis, M. (2001). Numerical simulations of the dependency of flow pattern on impeller clearance in stirred vessels, *Chemical Engineering Science*, 56(12), 3751–3770. doi:10.1016/S0009-2509(01)00089-6
- [50] Gu, D., Xu, H., Ye, M. & Wen, L. (2022). Design of impeller blades for intensification on fluid mixing process in a stirred tank, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 138, 104475. doi:10.1016/j.jtice.2022.104475
- [51] Jia, Z., Zhang, S., Fang, K., Kong, B., Xie, M., Zhang, Q. & Yang, C. (2024). Assessment of stress-blended eddy simulation on prediction of flow characteristics in a Rushton impeller stirred tank, *Chemical Engineering Science*, 284, 119442. doi:10.1016/j.ces.2023.119442
- [52] Hartmann, H., Derksen, J. J., Montavon, C., Pearson, J., Hamill, I. S. & Van den Akker, H. E. A. (2004). Assessment of large eddy and RANS stirred tank simulations by means of LDA, *Chemical Engineering Science*, 59(12), 2419–2432. doi:10.1016/j.ces.2004.01.065
- [53] Li, Z., Song, G., Bao, Y. & Zhengming, G. (2013). Stereo-PIV Experiments and Large Eddy Simulations of Flow Fields in Stirred Tanks with Rushton and Curved-Blade Turbines, *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 59(4), 215–228. doi:10.1002/aic