

هیأت داوران نشریه این دوره

دکتر اسداله زاده، مهدی (سازمان انرژی اتمی)
 دکتر اقبال احمدی، محمدحسین (دانشگاه تفرش)
 دکتر اقبالی، حدیث (دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان)
 دکتر باکری، غلامرضا (دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل)
 دکتر پیگزاده، رضا (دانشگاه کردستان)
 دکتر حجازی، پریسا (دانشگاه علم و صنعت ایران)
 دکتر حسن زاده، مهدی (دانشگاه یزد)
 دکتر ذبیحی، محمد (دانشگاه صنعتی تبریز)

دکتر رهبری، حمیدرضا (دانشگاه صنعتی شاهرود)
 دکتر زرگرزاده، لیلا (دانشگاه صنعتی امیرکبیر)
 دکتر زهدی، سید حسین (دانشگاه سیستان و بلوچستان)
 دکتر سردشتی بیرجندی، محمدرضا (دانشگاه سیستان و بلوچستان)
 دکتر سعدی، مریم (پژوهشگاه صنعت نفت)
 دکتر شریعتی، احمد (دانشگاه صنعت نفت)
 دکتر شریعتی نیا، زهرا (دانشگاه صنعتی امیرکبیر)
 دکتر شریفی، حکیمه (دانشگاه یاسوج)
 دکتر عابدینی، رضا (دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل)

دکتر علمداری، امین (دانشگاه ارومیه)
 دکتر فخرالاسلام، محمد (دانشگاه تربیت مدرس)
 دکتر قائمی، احد (دانشگاه علم و صنعت ایران)
 دکتر کاظمی، حبیب الله (دانشگاه زنجان)
 دکتر کامران پیرزمان، آرش (دانشگاه علم و فناوری مازندران)
 دکتر نوروزبهری، سمیه (دانشگاه خوارزمی)
 دکتر نیک نام، مهدی (دانشگاه صنعتی قوچان)
 دکتر وطنی، علی (دانشگاه تهران)
 دکتر یوسفی، وجیهه (دانشگاه سیستان و بلوچستان)



شبیه سازی پیش بینانه در مهندسی شیمی: روندهای یک دهه و چشم اندازهای آینده

علی محبی

دانشگاه شهید باهنر کرمان

دینامیک مولکولی و واکنشی (ReaxFF-MD) تا مقیاس ذره‌ای با روش المان گسسته (DEM) و در نهایت، مقیاس پیوسته با دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) را به گونه‌ای یکپارچه کنیم که نه تنها پدیده‌های فیزیکی و شیمیایی را با دقت بالایی توصیف کند، بلکه هزینه و زمان مورد نیاز را برای توسعه فرایندهای نوین تا کسری از روش‌های سنتی کاهش دهد.

۱. دستاوردهای برجسته یک دهه: از روش‌های پیوسته تا

شبیه سازی چندمقیاسه

در یک دهه گذشته، روش‌های ترکیبی به‌ویژه جفت‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی با روش المان گسسته (CFD-DEM)، به‌عنوان پرکاربردترین و تأثیرگذارترین رویکرد در تحلیل سامانه‌های چندفازی مطرح شده‌اند. رشد نمایی انتشار مقالات در این حوزه، از حدود ۱۰۰ مقاله در سال ۲۰۱۵ به بیش از ۲۰۰ مقاله در سال ۲۰۱۸ (نماینده شده در WOS) گواهی بر این مدعی است. آنچه روش المان گسسته را از رویکردهای پیشین متمایز می‌کند، توانایی آن در تفکیک فاز جامد به ذرات منفرد و محاسبه برهم‌کنش‌های دقیق ذره-سیال، ذره-ذره و ذره-دیواره است. در این میان، دو رویکرد

در چند دهه گذشته، عرصه دانش و فناوری مهندسی شیمی، دستخوش یکی از عمیق‌ترین و تأثیرگذارترین تحولات مفهومی شده است. تحولی که در آن، مرزهای سنتی میان آزمایشگاه و محاسبات در حال حذف است و شبیه‌سازی عددی دیگر صرفاً ابزار کمکی برای تحلیل داده‌های تجربی نیست، بلکه به ستون اصلی طراحی، بهینه‌سازی، مقیاس‌دهی و حتی صدور گواهی‌نامه فرایندهای صنعتی تبدیل شده است. این دگرگونی اساسی که با عنوان مهندسی فرایند مجازی^۱ شناخته می‌شود، حاصل هم‌گرایی سه جریان قدرتمند طی یک دهه گذشته بوده است: نخست، پیشرفت‌های نمایی در توان محاسباتی بابت بهره‌گیری از رایانش با کارایی بالا (HPC) و پردازنده‌های گرافیکی (GPU)؛ دوم، بلوغ روش‌های عددی در مقیاس‌های مختلف از اتمی تا پیوسته؛ و سوم، افزایش بی‌سابقه تقاضا برای فرایندهای پاک، کم‌کربن و ایمن که آزمون‌های تجربی مرسوم توان پاسخ‌گویی به آن‌ها را ندارند. مدل‌سازی چندمقیاسه^۲ که آرزوی دیرینه مهندسان شیمی بود، امروز به واقعیت عملیاتی تبدیل شده است. در این چهارچوب، ما اکنون می‌توانیم با اتصال زنجیره‌ای از روش‌ها، از مقیاس اتمی با

1. Virtual Process Engineering
 2. Multiscale Modeling

اصلی حل شده^۱ که در آن جریان سیال پیرامون هر ذره به طور مستقیم حل می شود و حل نشده^۲ که با استفاده از مدل های بستار^۳ کارایی محاسباتی را به طور چشم گیری افزایش می دهد، هر یک جایگاه خود را در کاربردهای مختلف یافته اند. رویکرد حل نشده که باتکیه بر داده های حاصل از شبیه سازی مستقیم عددی در مقیاس ذره (PR-DNS) اعتبارسنجی شده، امکان شبیه سازی سیکلون های صنعتی با دقت ۵ تا ۱۵ درصد در پیش بینی افت فشار و نیز تحلیل بسترهای سیال با مقیاس های صنعتی را فراهم ساخته است.

در سوی دیگر طیف، روش دینامیک مولکولی واکنشی^۴ تحولی بنیادین در درک سازوکارهای واکنش های شیمیایی در مقیاس اتمی ایجاد کرده است. این روش که میدان های نیروی واکنشی را بر پایه داده های محاسبات کوانتومی آموزش می بیند، توانسته است مسیرهای واکنش در اکسایش سوخت های پیچیده را مانند JP-10، (سوخت جت) شبیه سازی کند و بینش های بی نظیری درباره پدیده هایی مانند تشکیل دوده و رشد خوشه های هیدروکربن های آروماتیک چندحلقه ای (PAH) ارائه دهد. این دستاوردها، پلی محکم میان مکانیک کوانتومی و سینتیک پیوسته ایجاد کرده و افق های جدیدی در طراحی کاتالیزورها و سوخت های پاک گشوده است.

۲. چالش های پیش رو: شکاف میان دقت، هزینه و اعتبارسنجی

با وجود این پیشرفت های شگرف، تأکید می شود که مسیر تحقق کامل مهندسی فرایند مجازی با موانع و چالش های جدی نیز همراه است. نخستین و مهم ترین چالش، مسأله ساختارهای میان مقیاس^۵ مانند خوشه ها و حباب ها در جریان های گاز-جامد است. شواهد نشان می دهد که این ساختارها می توانند تا ۷۰ و ۸۰ درصد تغییرپذیری ضریب درگ را تعیین کنند و نادیده گرفتن آنها در مدل های پیوسته سنتی مانند مدل دوسیاله (TFM) منجر به خطاهای ۲۰ تا ۵۰ درصدی در پیش بینی ها می شود. هرچند رویکردهای چندمقیاسه مانند روش کمینه سازی انرژی چندمقیاسه^۶ و مدل های بستار فیلترشده تا حد زیادی این شکاف را

پر کرده اند، اما توسعه مدل های جهانی برای سامانه های چندقطبی، ذرات غیرکروی و جریان های واکنشی همچنان نیازمند پژوهش های اساسی است. دومین چالش، هزینه های محاسباتی بالای روش های دقت تفکیک شده (مانند شبیه سازی LES یا DNS) است. در حالی که روش های حل شده CFD-DEM دقتی بالا در مقیاس های آزمایشگاهی (کمتر از ۱۰^۵ ذره) ارائه می دهند، کاربرد آنها در مقیاس صنعتی (میلیون ها تا میلیارد ها ذره) با محدودیت های سخت افزاری و زمانی مواجه است. هرچند استفاده از مدل های دانه درشت سازی^۷، پردازنده های گرافیکی و الگوریتم های موازی سازی، شبیه سازی تا ۱۰^{۱۱} ذره را در برخی موارد ممکن ساخته، اما این دستاوردها هنوز به یک قابلیت همگانی و در دسترس تبدیل نشده است. سومین چالش، موضوع اعتبارسنجی^۸ در زنجیره های چندمقیاسه است. اگرچه رویکردهای سلسله مراتبی از PR-DNS تا داده های پایلوت به طور فزاینده پذیرفته شده اند، اما همچنان شکاف های قابل توجهی در اعتبارسنجی سامانه های پلی دیسپرس (چندقطری)، ذرات غیرکروی و شرایط عملیاتی فوق بحرانی وجود دارد. این شکاف ها، به ویژه در کاربردهای مرتبط با گذار انرژی مانند راکتورهای گازی سازی زیست توده و سامانه های جذب دی اکسید کربن، نیازمند توجه ویژه پژوهشگران است.

۳. چشم انداز آینده: از مدل های فیزیکی به مدل های داده محور و هوشمند

مرور نظام مند منابع نشان می دهد که افق پیش روی روش های عددی در مهندسی شیمی، به شدت تحت تأثیر هم آمیختگی با فناوری های یادگیری ماشین^۹ و هوش مصنوعی خواهد بود. این هم آمیختگی در سه سطح در حال وقوع است: سطح نخست، توسعه مدل های بستار داده محور است. داده های حاصل از شبیه سازی های با دقت بالا مانند PR-DNS و LBM به عنوان مجموعه های آموزشی برای الگوریتم های یادگیری ماشین به کار گرفته می شوند تا مدل های بستاری با دقتی فراتر از روابط تجربی سنتی و با کارایی محاسباتی مناسب برای مقیاس های صنعتی ارائه دهند. این رویکرد، به ویژه در مدل سازی ضریب درگ برای ذرات غیرکروی و سامانه های چندقطبی، پتانسیل کاهش خطاهای پیش بینی را تا ۵۰ درصد دارا است. سطح دوم،

1. Resolved
2. Unresolved
3. Closure Models
4. ReaxFF-MD
5. Mesoscale Structures
6. Energy Minimization Multi-Scale

7. Coarse Graining
8. Validation
9. Machine Learning

بهینه‌سازی میدان‌های نیروی واکنشی با یادگیری ماشین است. پتانسیل‌های بین اتمی مبتنی بر یادگیری ماشین که دقت محاسبات کوانتومی را با سرعت مدل‌های کلاسیک ترکیب می‌کنند، به عنوان جانشین‌های قدرتمندی برای میدان‌های نیروی واکنشی سنتی مانند ReaxFF در حال ظهور هستند. این پتانسیل‌ها می‌توانند قابلیت انتقال مدل‌های اتمی را به طور چشم‌گیری افزایش دهند و امکان شبیه‌سازی سامانه‌های شیمیایی پیچیده‌تر با دقت بسیار بالا را فراهم آورند. سطح سوم، مهندسی فرایند مجازی بلادرنگ^۱ است. ترکیب مدل‌های کاهش‌یافته^۲ با یادگیری ماشین و بهره‌گیری از زیرساخت‌های رایانش ابری و لبه^۳، این امکان را ایجاد خواهد کرد که شبیه‌سازی‌های چندمقیاسه به عنوان دوقلوی دیجیتال^۴ واحدهای صنعتی، در زمان واقعی اجرا شوند و تصمیم‌گیری‌های عملیاتی را با دقتی فراتر از حسگرهای فیزیکی ممکن سازند. انتظار می‌رود به زودی، نخستین نمونه‌های صنعتی این فناوری در راکتورهای کلیدی مانند واحدهای شکست کاتالیستی بستر سیال (FCC) و راکتورهای احتراق حلقه‌ای شیمیایی (CLC) عملیاتی شوند.

۴. پیامدها برای صنعت و پژوهش در ایران

برای جامعه مهندسی شیمی ایران، این تحولات جهانی حاوی پیام‌های روشن و راهبردی است. نخست آنکه سرمایه‌گذاری در زیرساخت‌های محاسباتی پیشرفته (HPC) و (GPU Clusters) و توسعه نرم‌افزارهای متن‌باز و بومی، دیگر یک برتری رقابتی نیست، بلکه یک ضرورت انکارناپذیر برای بقاء در عرصه رقابت علمی و صنعتی است. دوم آنکه تربیت نیروی انسانی متخصص در حوزه‌های میان‌رشته‌ای که هم بر مبانی عمیق مهندسی شیمی (مکانیک سیالات، انتقال حرارت و جرم، ترمودینامیک و سینتیک) و هم بر روش‌های عددی پیشرفته و علم داده مسلط باشند، باید به اولویت اصلی برنامه‌های آموزشی و پژوهشی کشور تبدیل شود. سوم آنکه صنایع بزرگ کشور (نفت، پتروشیمی، پالایش، فولاد، مس، سیمان و نیروگاه‌ها) باید از فرصت بی‌نظیر مهندسی فرایند مجازی برای کاهش هزینه‌های مقیاس‌دهی، بهینه‌سازی مصرف انرژی، افزایش ایمنی (با پیش‌بینی سناریوهای خطر با دقت بیش از ۹۰ درصد) و توسعه فرایندهای پاک (مانند گازی‌سازی زیست‌توده و جذب کربن)

1. Real Time-VPE
2. Reduced-Order Models
3. Edge Computing
4. Digital Twin

استفاده‌کنند. تجربه جهانی نشان داده‌است که هزینه‌های سرمایه‌گذاری در شبیه‌سازی‌های پیشرفته، معمولاً ظرف یک تا دو سال از راه کاهش آزمون‌های تجربی و افزایش بازده فرایند جبران می‌شود.

۵. جمع‌بندی و توصیه‌های راهبردی

این وجیزه، با رویکردی تحلیلی-انتقادی، نشان می‌دهد که مهندسی شیمی در آستانه ورود به عصر جدیدی است که در آن، آزمایشگاه مجازی جایگزین کارگاه آزمون و خطا می‌شود. این گذار، حاصل سه دهه تلاش پیوسته برای توسعه روش‌های عددی، افزایش توان محاسباتی و درک عمیق‌تر از پدیده‌های چندمقیاسه است. با این حال، مسیر پیش‌رو همچنان با چالش‌های اساسی در زمینه اعتبارسنجی، هزینه‌های محاسباتی و توسعه مدل‌های بستر جهانی همراه است. بر این اساس، توصیه‌های زیر برای سیاست‌گذاری علمی و فناوری کشور در حوزه روش‌های عددی و شبیه‌سازی در مهندسی شیمی قابل طرح است:

- ایجاد مراکز ملی شبیه‌سازی پیشرفته فرایندهای شیمیایی: با تمرکز بر توسعه و به کارگیری روش‌های چندمقیاسه و بهره‌گیری از زیرساخت‌های HPC و GPU.
- حمایت از پژوهش‌های بین‌رشته‌ای در حوزه یادگیری ماشین و مدل‌سازی فرایند: با هدف توسعه مدل‌های بستر داده‌محور و پتانسیل‌های بین‌اتمی مبتنی بر هوش مصنوعی.
- ایجاد پایگاه داده ملی اعتبارسنجی: با هدف گردآوری داده‌های تجربی و شبیه‌سازی با دقت بالا برای توسعه و اعتبارسنجی مدل‌های بومی.
- برنامه‌ریزی برای تربیت نسل جدید مهندسان شیمی: با بازنگری در سرفصل‌های آموزشی و افزودن دروس تخصصی در زمینه روش‌های عددی پیشرفته، مدل‌سازی چندمقیاسه و علم داده.
- تشویق همکاری‌های صنعت-دانشگاه در قالب پروژه‌های مهندسی فرایند مجازی: با هدف انتقال فناوری و توسعه نمونه‌های صنعتی دوقلوی دیجیتال برای واحدهای فرایندی کلیدی.