شبیه‌سازی سرعت در فرایندهای کاربردی

خطیب‌الاسلام صدرنژاد (دانشیار)
مسعود رضایی، سامان کندی، محمود دمالی امیری
دانشکده مهندسی متالورژی

چکیده

یک بسته نرم‌افزاری به اسم CRMS برای ثبت، نگهداری و بازیابی اطلاعات مربوط به سرعت و مکانیزم واکنشهای شیمیایی ساخته شده است. به کمک این برنامه می‌توان نسبت به ذخیره حجم قابل‌ملاحظه‌ای از یافته‌های سینتیکی با سرعت و دقت زیاد اقدام کرد. اطلاعات جمع‌آوری شده از کتابها، مجلات و سمینارهای علمی پس از دسته‌بندی، تکمیل، تصحیح و تنظیم به فرم استاندارد، در چند فایل اطلاعاتی، ذخیره می‌شوند. این فایلها قادر به نگهداری اطلاعات مربوط به واکنشهای پیچیده همگن و غیرهمگن برای دسته‌بندی و بازیابیهای مکرر هستند. تاکنون حدود یکصد فرایند کاربردی مهم در این بانک به ثبت رسیده است.

۱ مقدمه

دستیابی به اطلاعات سینتیکی یکی از مراحل بنیانی در اجرای هر فعالیت تحقیقاتی مرتبط با طراحی و ساخت یک مادهٔ نو، یک فرایند جدید و یا یک تکنولوژی ابتکاری مدرن است. در حال حاضر مطالب علمی مدون در این زمینه بسیار کمیاب، غالباً متناقض و در عین حال پراکنده هستند. به‌طوری که استاندارد کردن روش تحقیق، ارائه، ضبط، دسته‌بندی و بازیابی این اطلاعات نه تنها خدمت مهمی به محققین رشته مهندسی متالورژی و نهایتاً مهندسی مواد به حساب می‌آید، بلکه تأثیر اساسی در توسعه صنایع تولید و آماده‌سازی فلزات و آلیاژها در سطح کشور و جهان خواهد داشت.

هدف این تحقیق ساختن نرم‌افزاری است که نه تنها قادر به ثبت و ضبط معادلات سینتیکی واکنشهاست، بلکه تلاشی برای استاندارد کردن روش پژوهش، تدوین و ارائهٔ اطلاعات سینتیکی مربوط به سرعت و مکانیزم فرایندهای پیچیده نیز محسوب می‌شود. هم‌اکنون تعداد قابل‌توجهی مقاله و نوشتهٔ علمی منتشر شده در مجلات و کتب علمی معتبر بررسی شده است به‌طوری که از طریق انطباق یافته‌های تجربی مربوط به پدیدهٔ سرعت در فرایندهای مهندسی مواد و متالورژی با اصول نظری حاکم بر آنها، در مورد صحت اطلاعات ارائه شده، کنکاشی همه جانبه در جریان است.

از روشهای محاسباتی به منظور پر کردن حفره‌های خالی، محک زدن داده‌ها و تصحیح و تکمیل یافته‌های کمّی سینتیکی به‌عنوان ابزار نیرومندی برای تشخیص صحت نتایج در هنگام مواجهه با اطلاعات متناقض استفاده می‌شود. موارد اشکال و ابهام به طریق تجربی و آزمایشی تحقیق و نتیجه به‌صورت یک بانک اطلاعات سینتیکی ارائه می‌شود. اگر چه تعمیم این تحقیق به سایر تحولات نیز کاملاً میسر است، اما به منظور پرهیز از توسعه و پیچیده شدن بیش از حد کار، پژوهش فعلی بیشتر فرایندهای دارای کاربرد در زمینه‌های تولید و به‌کارگیری مواد فلزی را پوشش می‌دهد.

۲ سابقه

نرم‌افزارهای ساخته‌شده در مورد سینتیک واکنشها، بسیار محدود و مختص شرایط و تحولات خاص هستند. نرم‌افزار SMAK برای مثال توسط محققین مرکز تحقیقات مواد معدنی برای پیرومتالورژی به منظور محاسبه سینتیک واکنشهای بین فلز، سرباره و گاز در فرایندهای ذوب و تصفیه فلزات استفاده شده است [۱]. کمپانی فولاد Nippon برای کنترل عملیات گوگردزدایی و فسفرزدایی از آهن خام، به‌طور موفقیت‌آمیز از این نرم‌افزار استفاده کرده است[۲]. این نرم‌افزار در عین حال محدودیتهای فراوانی دارد. برای مثال کمبود اطلاعات در مورد اکتیویته فلزات، اکسیدها و سولفیدهای موجود در فازهای موجود در راکتورهای ذوب و تصفیهٔ فلز به‌علاوه مشکلات مربوط به نحوهٔ محاسبه سرعت تحولات بین فلزی، ضرورت توسعه و تکمیل SMAK را برای استفاده‌های بعدی در طراحی فرایند آشکار ساخته است [۳].

نرم‌افزار CRS [۴] برای محاسبهٔ معادلهٔ سرعت و مکانیزم واکنشهای گاز-جامد برای قطعات غیرمتخلخل در دانشکدهٔ مهندسی متالورژی دانشگاه صنعتی شریف ساخته شده است. فرم کاملتر این نرم‌افزار مشتمل بر واکنشهای گاز-جامد برای کلیهٔ قطعات اعم از متخلخل و غیرمتخلخل MKS نام گرفته و در دست تهیه می‌باشد. نرم‌افزار MKS مشتمل بر دو قسمت مجزا یکی برای انجام محاسبات ریاضی به منظور تعیین معادلهٔ کلی سرعت و انتخاب نزدیکترین مکانیزم و دیگری برای ضبط، نگهداری و دسته‌بندی اطلاعات سینتیکی در مورد فرایندهای متالورژی و مهندسی مواد است [۵]. بانک اطلاعاتی نرم‌افزار اخیر که MKSDB نام دارد مشتمل بر فایلهای اطلاعاتی برای ذخیره، دسته‌بندی و بازیابی اطلاعات سینتیکی مربوط به فرایندهای همگن، غیرهمگن و الکتروشیمیایی است.

به غیر از فعالیتهای شبیه‌سازی فوق، نرم‌افزار کامپیوتری دیگری که بتواند نسبت به محاسبه یا ذخیرهٔ اطلاعات سینتیکی فرایندهای کاربردی عمل کند تاکنون ارائه نشده است [۳]. علیهذا با توجه به کمبود نرم‌افزار و ضعف برنامه‌های محاسباتی در توجیه شرایط واقعی عملیات در فرایندهای پیچیده و متنوع متالورژی و مهندسی مواد همراه با عدم هماهنگی در شیوهٔ ثبت و نگهداری

یافته‌ها، لزوم طراحی و ساخت نرم‌افزارهای قابل و قادر در این زمینه‌ها آشکار می‌شود.

۳ برنامه CRMS

هدفهای اصلی برنامه CRMS ذخیره و بازیابی اطلاعات سینتیکی با سرعت قابل‌قبول و صرفه‌جویی در حافظه است. برای تحقق این هدفها، ضابطه‌های اساسی زیر در نظر گرفته می‌شوند:

۱ـ حداقل بودن میزان افزونگی برای کاهش میزان مصرف حافظه و کاهش هزینه بهنگام‌سازی.

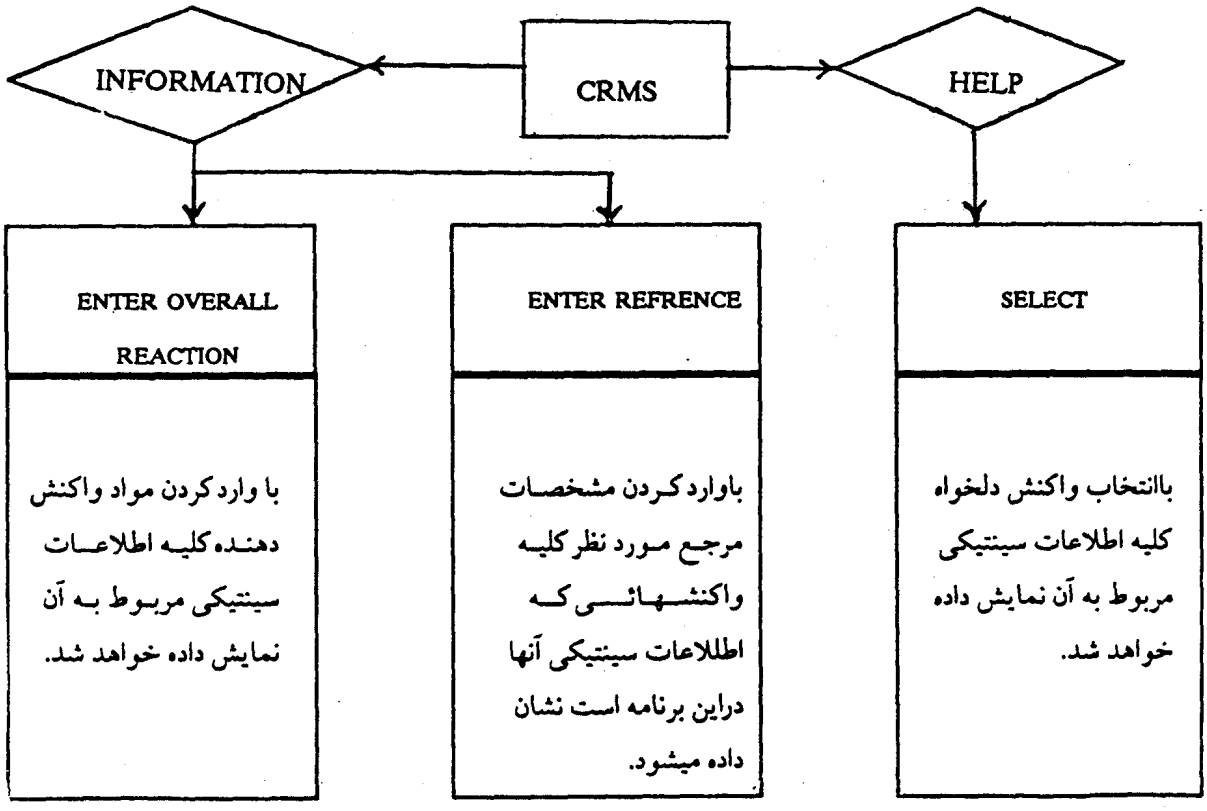
۲ـ دستیابی سریع برای حداقل کردن مصرف وقت توسط کاربر.

۳ـ سهولت در عملیات بهنگام‌سازی.

۴ـ سهولت در نگهداری سیستم.

۵ـ قابلیت اطمینان کافی.

شکل ۱ ساختار برنامه CRMS را به‌طور تصویری نشان می‌دهد. عملیات با دریافت اسم مواد واکنش‌دهنده و نشانی مرجع اطلاعات آغاز می‌شود. سپس جستجو برای انطباق داده‌های جدید با اطلاعات موجود انجام شده و در صورت وجود انطباق، مشخصات قبلی نمایش داده خواهد شد. از آنجا که عملیات خواندن و انطباق به‌صورت حرف به حرف زمانبر است، لذا برای سرعت دادن به این کار از یک استراتژی دستیابی مستقیم موسوم به شاخص استفاده می‌شود. کار شاخص حرکت روی حروف



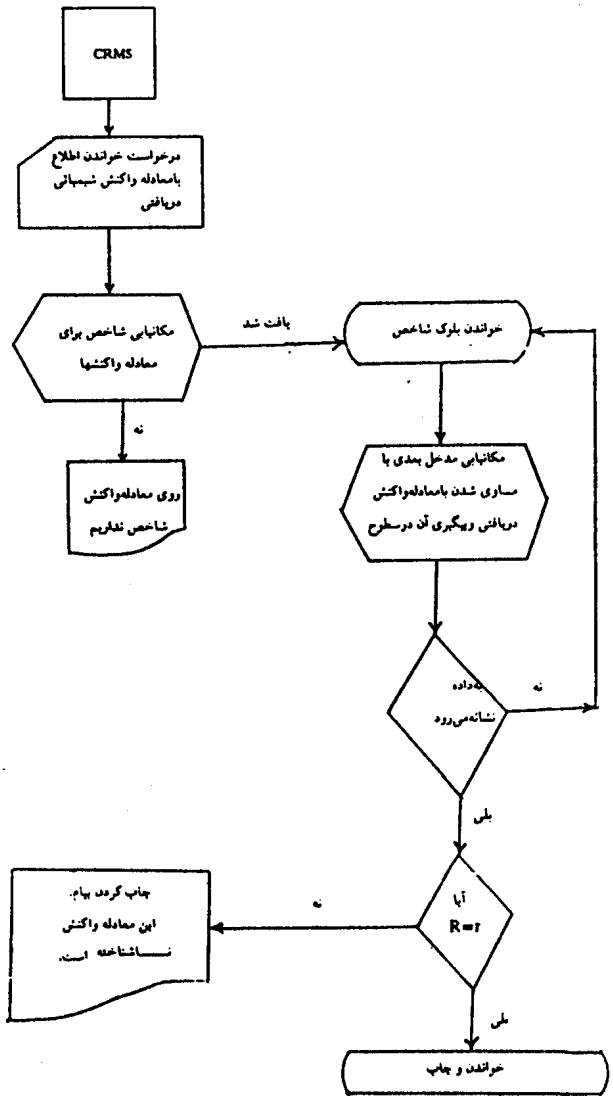
شکل۱ ساختارکلی برنامه CRMS.

موجود در شاخه مناسب فایل اطلاعاتی و خواندن و مقایسه با حروف داده شدهٔ جدید است. نحوهٔ انجام این عملیات در شکل ۲ نمایش داده شده است.

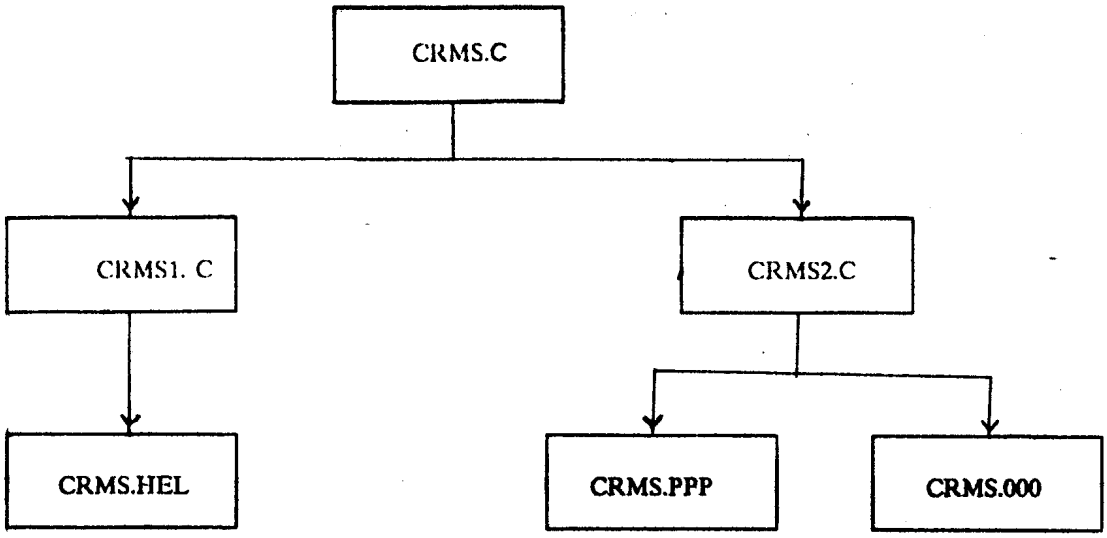
۴ کاربرد

برای دستیابی به اطلاعات برنامه CRMS، راههای متعددی وجود دارد. یکی از این راهها صدازدن فایل CRMS1 در برنامه اصلی است (شکل ۳) که با فشارکلید H انجام می‌شود. برنامه CRMS1 قابلیتهای قسمت کمک HELP را فراهم می‌سازد. با حرکت مکان‌نما به محل واکنش دلخواه در این برنامه و فشارکلید Tab به اطلاعات مورد نیاز دست می‌یابیم. خروج از برنامه به کمک کلید ESC انجام می‌شود.

با صدا زدن فایل CRMS2 در برنامه اصلی نیز می‌توان به اطلاعات مورد نیاز دست یافت. برای این کار به جستجوی



شکل۲ فلوچارت برنامه CRMS.



شکل۳ اسکلت برنامه CRMS.

واکنش در قسمت INFORMATION یا HELP می‌پردازیم. در صورت وجود معادلهٔ واکنش در فایل CRMS.PPP یا اطلاعات مرجع واکنش در فایل CRMS.OOO، نتیجه به نمایش گذاشته خواهد شد. برای مشاهده لیست واکنشهای موجود، فایل CRMS.HEL در برنامه اصلی صدا زده می‌شود.

بنابراین هر قسمت از اسکلت برنامه (شکل۳) از طریق صدازدن در برنامه اصلی در موقع مناسب، وارد عمل می‌شود. برنامه اصلی CRMS.C در اینجا رهبری و هدایت عملیات را به‌عهده داشته و محمل ورود به برنامه‌های وابسته است. ورود این برنامه از طریق تایپ اسم برنامه یعنی CRMS و فشار دادن کلید Enter انجام می‌شود. سایر قسمتهای برنامه نیز بر اساس حداکثر سادگی و وضوح، طراحی و ساخته شده است.

مثال ۱: برای به‌دست آوردن اطلاعات سینتیکی در مورد واکنش همگن بین گازهای منواکسیدکربن و کلر، کلید Enter را در برنامه CRMS فشار داده و اطلاعات خواسته شده را به‌صورت شکل ۴ کامل کنید. با فشار دادن مجدد کلید Enter اطلاعات سینتیکی در مورد واکنش به‌صورت شکل ۵ نمایش داده خواهد شد.

مثال ۲: برای بازیابی اطلاعات سینتیکی در مورد احیای اکسید نیکل توسط هیدروژن، اطلاعات خواسته شده را مطابق شکل ۶ تکمیل و کلید Enter را فشار دهید. اطلاعات موجود در بانک اطلاعات سینتیکی به صورت نمایش داده شده در شکل ۷ ظاهر خواهد شد.

۵ قابلیتها

جستجوی بانک اطلاعات واکنشهای همگن و غیرهمگن توسط بسته نرم‌افزاری CRMS هم بر اساس عوامل واکنش و هم بر طبق نام مرجع ارائه‌کنندهٔ اطلاعات امکان‌پذیر است. این برنامه همچنین می‌تواند فهرست الفبایی کلیهٔ واکنشهای موجود در حافظه را به نمایش گذاشته و از این طریق امکان وارسی و انتخاب سریع یک فرایند ناشناس را به‌وجود آورد. برای مثال کاربر می‌تواند با

ENTER OVERALL REACTION :

ENTER REFERENCE :

ENTER OVERALL REACTION : $CO(g) + Cl_2(g)$

شکل۴ صفحه ورود واکنش یا مرجع.

OVERALL REACTION : $CO(g) + Cl_2(g) \rightarrow CoCl_2(g)$

TYPE OF REACTION : Homogeneous

MECHANISEM:

$Cl_2 \rightarrow 2Cl$

$Cl + Co \rightarrow CoCl$

$CoCl + Cl_2 \rightarrow CoCl_2 + Cl$

$2Cl \rightarrow Cl_2$

RATE EQUATION : $\frac{d[CoCl_2]}{dt} = k\,[Cl_2^{3/2}\,[Co]$

k = equivalent Constant

REFERENCE : K. LAIDLER, " Chemical Kinetics ", Mc. GRAW HILL, (1965), 371, 372

TYPIST : M. REZAEI and M. D. AMIRI

DATE : 72/12/5

شکل۵ نمایش اطلاعات سینتیکی در مورد واکنش همگن منواکسیدکربن با کلر.

ENTER OVERALL REACTION : $3H_2(g) + Ni_2O_3(S)$

شکل۶ صفحه ورود واکنش یا مرجع.

OVERALL REACTION : $3H_2(g) + Ni_2O_3(s) \rightarrow 2Ni(s) + 3H_2O(g)$

TYPE OF REACTION : Heterogeneous

MECHANISEM : Unknown

RATE EQUATION:

$$gFg(X) = 1 - (1 - X)^{(1/Fg)} = \frac{KC_A \cdot S_A}{Fg} t$$

gFg (X): Function Defined by the Above Equation.

X : Extent of Reactain.

Fg : Shape Factor for Grains (Spherical: 3, Rod-like: 2 and Flat: 1)

K : Rate Constant of the Reaction, Cm/S

C_A : Reactant Gas Concentration

S_A : Specific Surface Area of Solid (Cm^3 /mole)

REFERENCE: J. W. EVANS, S. SONG AND C. E. LEON-CUCRE, "The Kinetics of Nickel Oxside Reaction by Hydrogen, Measurments in a Fluidized Bed and in a Gravimetric Apparatus". METALLURGICAL TRANSACTIONS. Vol 7B. MARCH 1976. 55.

TYPIST : M. REZAEI and M. D. AMIRI.

DATE: 72-7-12

شکل۷ نمایش اطلاعات سینتیکی درمورد واکنش غیرهمگن احیای اکسید نیکل با ئیدروژن.

مکان‌نما به زیر واکنش مورد نظر رفته و با فشار دادن کلید Tab، اطلاعات مطلوب را بیابد. با استفاده از نرم‌افزار CRMS، کاربر در حقیقت قادر می‌شود که یک کتاب یا مجله علمی را در حداقل وقت ورق زده و به اطلاعات سینتیکی ارائه شده در آن دست یابد. گسترش و پراکندگی یافته‌های علمی مربوط به سرعت و مکانیزم واکنشها که در کتب و مقالات مربوط به چشم می‌خورد، فواید استفاده از نرم‌افزار CRMS را در ثبت، جستجو و بازیابی سریع، مؤثر، موجز و جامع این نوع اطلاعات بازگو می‌کند.

موجودی CRMS فعلاً حدود یکصد فرایند است که دوازده درصد آن از نوع همگن و مابقی از نوع غیرهمگن می‌باشد. فعالیتهای تحقیقاتی به منظور اصلاح، بهبود و تکمیل برنامه‌ها همزمان با استخراج و ذخیره اطلاعات بیشتر در حال اجراست.

مراجع

[۱] صدرنژاد، «گزارش شرکت در چهارمین کنفرانس دوسالانه نرم‌افزارهای کامپیوتری برای محاسبات متالورژی استخراجی و شیمیایی»، دانشکده مهندسی متالورژی و معاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی شریف، تیر ماه ۱۳۷۱.

[2] Robertson and Nelson, "SMAK: Kinetics of Slag-Metal-Gas Reaction in Smelting and Refining": **Fourth Biennial Conference on Computer Software for Chem. and Extrac. Metallurgy Calculations, Missouri-Rolla**, June 1992, P 25.

[3] Morris and Stephenson, "Computer Software for Chemical and Extractive Metallurgy Calculations": **J. of Metals,** 45(1993), 29-31.

[4] Sadrnezhaad, Gharavi and Morvarid, "Simulation of Chemical Reactions": **Forth Biennial Conf. on Computer Software for Chem. and Extrac. Metall. Calculations, Missouri-Rolla,** June 1992, P 26.

[5] Sadrnezhaad, Gharavi and Namazi, "Rate and Mechanism of Metallurgical Proccesses: Computer Simulation": Submitted for publication.