

طراحی راکتور پیشرفته

مرجع: طراحی راکتورهای شیمیایی، لون اشپیل

Ref.: Chemical Reaction Engineering, Levenspiel

مدرس: یگانه داودبیگی

(جلسه هشتم)

مثال ۲: از ظرفی که در مثال ۱ بیان شد به عنوان راکتور استفاده می‌کنیم و در آن واکنش تجزیه در فاز مایع با معادله سرعت زیر انجام می‌شود:

$$(-r_A) = kC_A, \quad k = 0.307 \text{ min}^{-1}$$

جزء جسم تبدیل نشده را محاسبه نموده و نتیجه را با یک راکتور پلاگ با همان زمان اقامت مقایسه کنید.

$$\frac{C_{A,out}}{C_{A0}} = \int_0^\infty e^{-kt_i} \cdot E_i \cdot dt_i$$

t	E	kt	e^{-kt}	$e^{-kt}E \Delta t$
5	0.03	1.53	0.2154	$(0.2154)(0.03)(5) = 0.0323$
10	0.05	3.07	0.0464	0.0116
15	0.05	4.60	0.0100	0.0025
20	0.04	6.14	0.0021	0.0004
25	0.02	7.68	0.0005	0.0001
30	0.01	9.21	0.0001	0
				$\sum e^{-kt}E \Delta t = 0.0469$

درصد تبدیل 95.3 خواهد شد. به عبارتی 4.7 درصد A ورودی به صورت ترکیب نشده بیرون می‌رود.

$$\tau = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} = -\frac{1}{k} \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{A0}}{C_A}$$

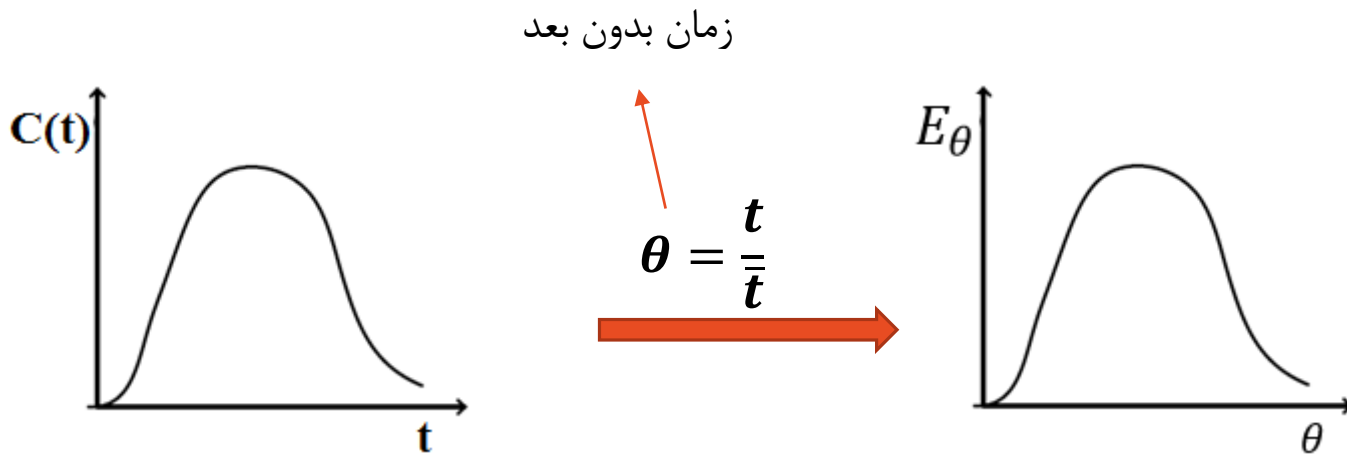
$$\bar{t}_c = \frac{\sum_{t=0}^{\infty} t_i \cdot c_i}{\sum_{t=0}^{\infty} c_i} = 15 \text{ min}$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-k\tau} = e^{-(0.307)(15)} = e^{-4.6} = 0.01$$

در راکتور پلاگ فقط ۱٪ از A ترکیب نشده بیرون می‌رود.

* در راکتور مورد استفاده به علت وجود مولکول‌هایی با زمان اقامت بسیار کوتاه (کانالیزه شدن جریان)، راندمان کمتری نسبت به حالت پلاگ ایده‌آل داریم.

توابع جزئی بدون بعد:



$$\theta = \frac{t}{\bar{t}} \longrightarrow d\theta = \frac{dt}{\bar{t}}$$

$$E_t = \frac{dF_t}{dt} = \underbrace{\frac{dF_\theta}{d\theta}}_{E_\theta} \times \frac{d\theta}{dt} = \frac{E_\theta}{\bar{t}} \longrightarrow \boxed{E_\theta = E_t \times \bar{t}}$$

مدل‌های جریان غیرایده‌آل (جریان واقعی) سیال در راکتور

این مدل‌ها جهت تعیین میزان انحراف سیستم‌های حقیقی از حالت ایده‌آل به کار می‌روند و به دو نوع تقسیم می‌شوند:

(۱) مدل‌های یک پارامتری (مدل‌های ساده): برای بیان انحراف ناچیز از حالت ایده‌آل (کامل) به کار می‌روند، مثلاً در بسترهای آکنده میزان انحراف از جریان پلاگ کامل، ناچیز بوده و این مدل‌ها مناسب هستند.

این مدل‌ها بر دو نوع اند:

(الف) مدل پراکندگی (نفوذی) یا مدل اختلاط محوری یا مدل جریان معکوس.

(ب) مدل جریان در n راکتور CSTR سری

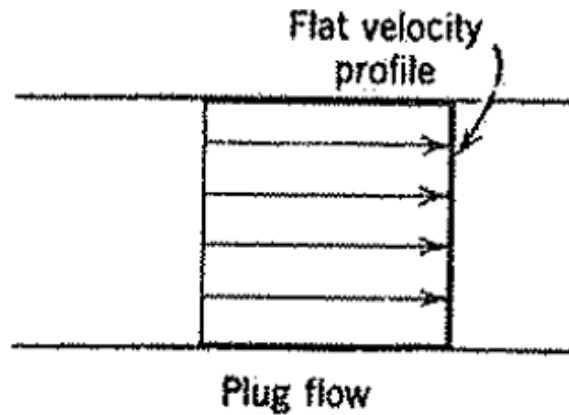
(۲) مدل‌های چند پارامتری (مدل‌های پیچیده): برای هنگامی است که انحراف قابل توجهی از حالت ایده‌آل داشته باشیم و رفتار واقعی راکتور را نتوان فقط با یک پارامتر بیان نمود. مثلاً وجود فضای مردابی، $by\ pass$ شدن سیال و ... بصورت همزمان وجود داشته باشند. (این مدل‌ها بیشتر برای راکتورهای بستر سیال استفاده می‌شوند).

مدل پراکندگی (Dispersed Plug Flow):

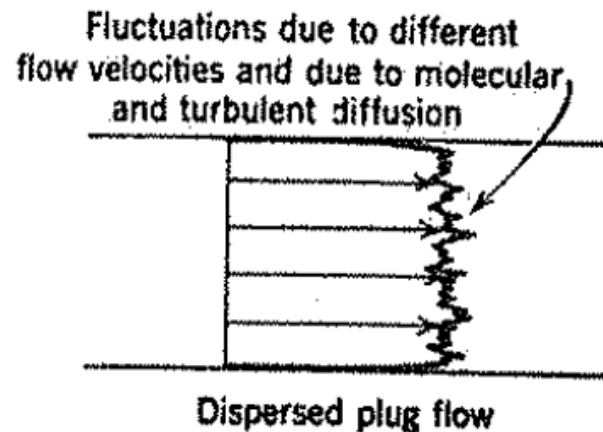
یک راکتور پلاگ را در نظر بگیرید، در عمل دو حالت حدی داریم:

(۱) از لحاظ هیدرودینامیکی راکتور پلاگ باشد ولی نفوذ مولکولی داشته باشیم.

ویسکوزیته کم، دبی کم، گرادیان غلظت زیاد



(۲) اگر نفوذ مولکولی قابل صرفنظر باشد ولی از لحاظ هیدرودینامیکی جریان پلاگ نداشته باشیم یعنی مولفه‌های سرعت یکسان نباشند بنابراین اختلاط و انتقال جرم به دلیل حرکت معکوس سیال خواهد بود و نه به دلیل نفوذ مولکولی.



چیزی که در عمل داریم مجموعه‌ای از دو حالت فوق است که به آن جریان پراکنده یا Dispersed flow گوییم که در آن اختلاط مواد در اثر لغزش و حرکات گردابی سیال و نیز نفوذ مولکولی است که به طور مکرر در جریان سیال تکرار می‌شود.

در این نوع پراکندگی اگر از اختلاط شعاعی صرف‌نظر کنیم به آن پراکندگی طولی یا محوری گویند که توسط پارامتری شبیه نفوذ مولکولی بیان می‌شود.

Fick's Law $J_A = -D_{\vartheta} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial x}$

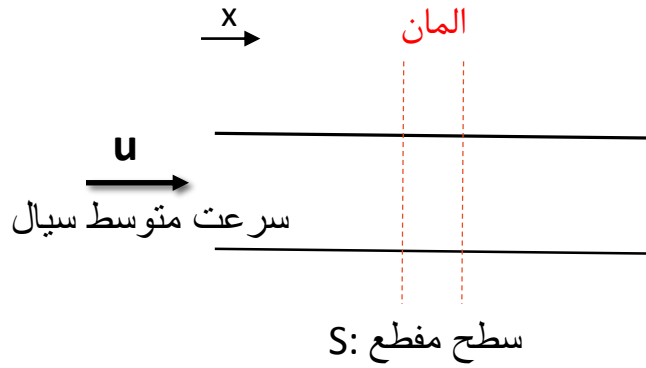
Molecular diffusivity

Eddy diffusivity

$D \equiv$ اثر اختلاط معکوس + اثر نفوذ مولکولی ضریب پراکندگی محوری

* همان معادلات نفوذ مولکولی را به کار می‌بریم فقط به جای D_{ϑ} از D استفاده می‌کنیم.

موازنه جرم در حالت ناپایا با فرض عدم واکنش شیمیایی:



جرم ورودی به المان

$$\left[u \cdot C_A \cdot S - D \cdot S \cdot \frac{\partial C_A}{\partial x} \right]_x - \left[u \cdot C_A \cdot S - D \cdot S \cdot \frac{\partial C_A}{\partial x} \right]_{x+dx} = S \cdot dx \cdot \frac{\partial C_A}{\partial t}$$

$$-u \cdot \frac{\partial C_A}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} = \frac{\partial C_A}{\partial t}$$

بصورت بدون بعد:

$$z = \frac{x}{L} \rightarrow dz = \frac{1}{L} \cdot dx$$

طول لوله (ظرف)

$$\theta = \frac{t}{\bar{t}} = \frac{t}{L/u} = \frac{t \cdot u}{L} \rightarrow d\theta = \frac{u}{L} \cdot dt$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial x} = \frac{\partial C_A}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial x} = \frac{1}{L} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial z}$$

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} = \frac{1}{L^2} \cdot \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial C_A}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{u}{L} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$

جایگذاری در معادله دیفرانسیل

$$-u \cdot \frac{\partial C_A}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} = \frac{\partial C_A}{\partial t}$$

$$-\frac{u}{L} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial z} + \frac{D}{L^2} \cdot \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} = \frac{u}{L} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial \theta} = \left(\frac{D}{uL} \right) \cdot \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - \frac{\partial C_A}{\partial z}$$

Vessel Dispersion No. عدد پراکندگی ظرف $\frac{D}{uL}$