طراحی راکتور پیشرفته

مرجع: طراحی راکتورهای شیمیایی، لون اشپیل

ترجمه دکتر سهرابی

Ref.: Chemical Reaction Engineering, Levenspiel

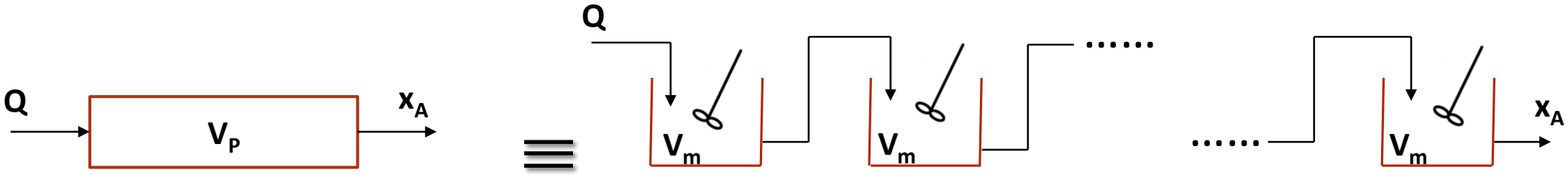
مدرس: یگانه داودبیگی

(جلسه دوازدهم)

مدل مخازن پشت سر هم:

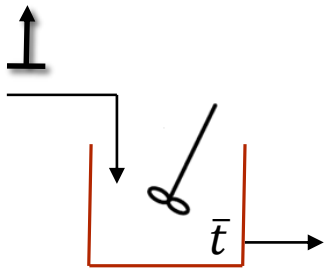
این مدل در مواقعی که پراکندگی زیاد باشد نیز قابل استفاده است.

یادآوری: قبلاً گفتیم رفتار راکتورهای حقیقی چیزی بین دو حالت حدی plug و mixed ایده‌آل هستند. اگر بخواهیم از راکتور plug به mixed برویم. از راکتور (جریان) Recycle استفاده می‌کنیم و هر چه R بیشتر باشد D/uL بیشتر می‌شود یعنی راکتور به سمت mixed می‌رود. اگر بخواهیم از راکتور mixed به سمت راکتور plug برویم، از راکتورهای mixed پشت سر هم استفاده می‌کنیم و هرچه تعداد آن‌ها را زیادتر کنیم به سمت راکتور plug ایده-آل نزدیک‌تر می‌شویم. به عبارتی رفتار یک راکتور plug ایده‌آل معادل بی‌نهایت راکتور CSTR سری است به شرطی که حجم تمام CSTRها با حجم راکتور plug یکی باشد.



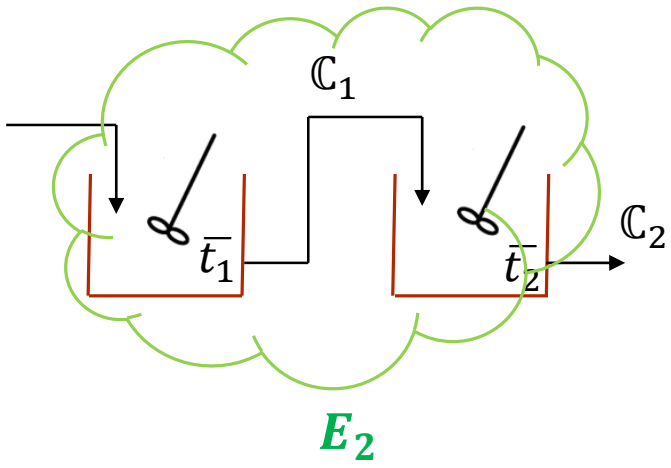
شرط اساسی $V_P = \sum_{1}^{\infty} V_m$

اگر یک مخزن mixed داشته باشیم و زمان اقامت سیال در این مخزن $\bar{t}$ باشد



$$\mathbb{C}_{out} = E = \frac{1}{\bar{t}} e^{-\frac{t}{\bar{t}}}$$

اگر دو مخزن mixed سری با حجم‌های یکسان داشته باشیم و زمان اقامت هر کدام $\bar{t_i}$ باشد:



$$\mathbb{C}_1 = E_1 = \frac{1}{\bar{t_i}} e^{-\frac{t}{\bar{t_i}}} \rightarrow \bar{t_i}.E = e^{-\frac{t}{\bar{t_i}}}$$

$$E_2 = \int_0^t \mathbb{C}_1(t').E(t-t').dt'$$

$$E_2 = \int_0^t \frac{1}{\bar{t_i}} e^{-\frac{t'}{\bar{t_i}}} . \frac{1}{\bar{t_i}} e^{-\frac{(t-t')}{\bar{t_i}}} . dt' = \frac{1}{\bar{t_i}^2} \int_0^t e^{\frac{-t'-t+t'}{\bar{t_i}}} . dt' = \frac{1}{\bar{t_i}^2} \int_0^t e^{\frac{-t}{\bar{t_i}}} . dt'$$

$$E_2 = \frac{t}{\bar{t_i}^2} e^{\frac{-t}{\bar{t_i}}} \rightarrow \bar{t_i}.E_2 = \left(\frac{t}{\bar{t_i}}\right).e^{\frac{-t}{\bar{t_i}}}$$

به همین ترتیب برای n راکتور متساوی الحجم سری:

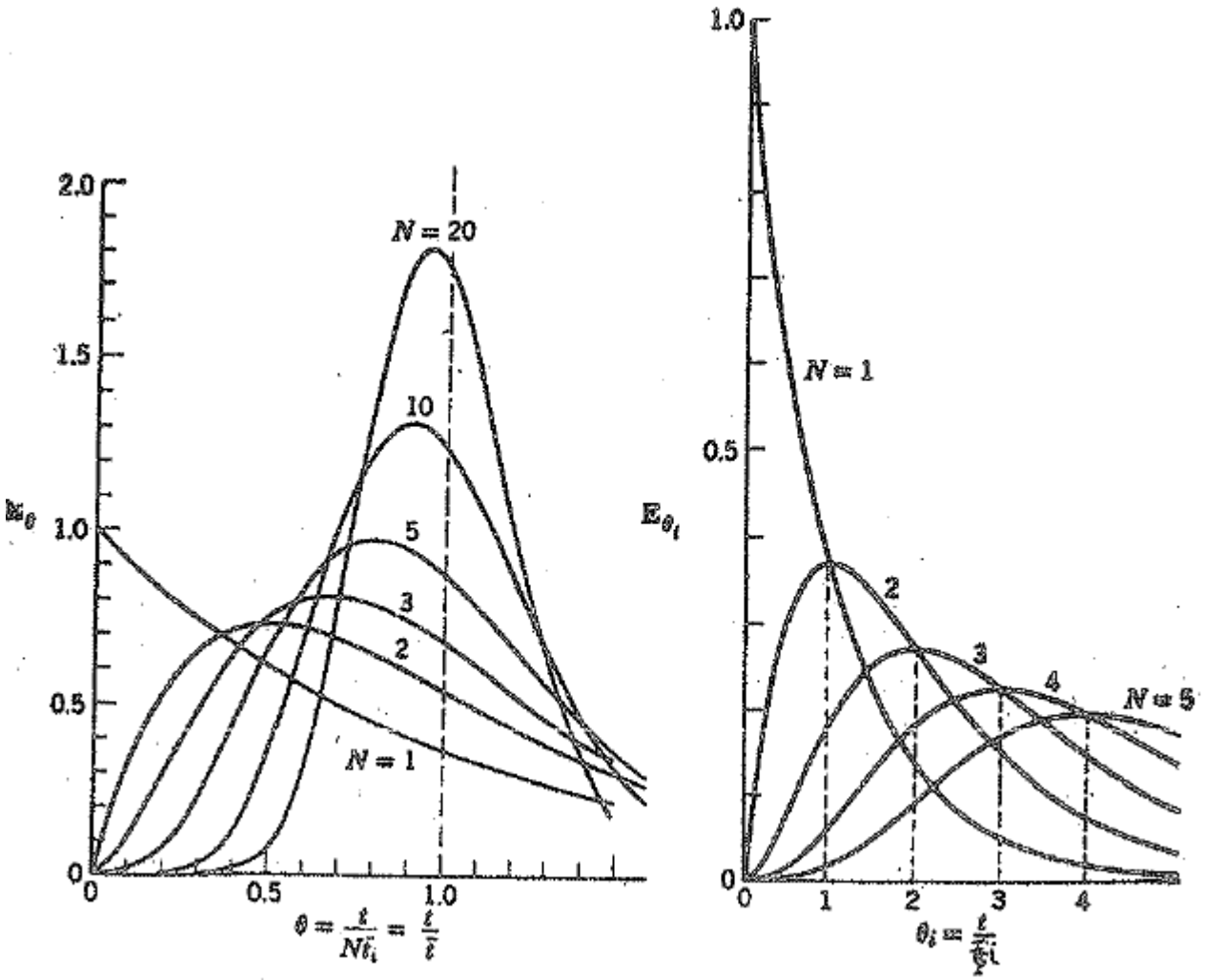
$E = E_N =$ E مربوط به N راکتور سری

$$\bar{t}_i . E = \left(\frac{t}{\bar{t}_i}\right)^{N-1} . \frac{1}{(N-1)!} . e^{\frac{-t}{\bar{t}_i}}$$

$$\theta_i = \frac{t}{\bar{t}_i} \rightarrow E_{\theta_i} = \bar{t}_i . E = \frac{{\theta_i}^{N-1}}{(N-1)!} . e^{-\theta_i}$$

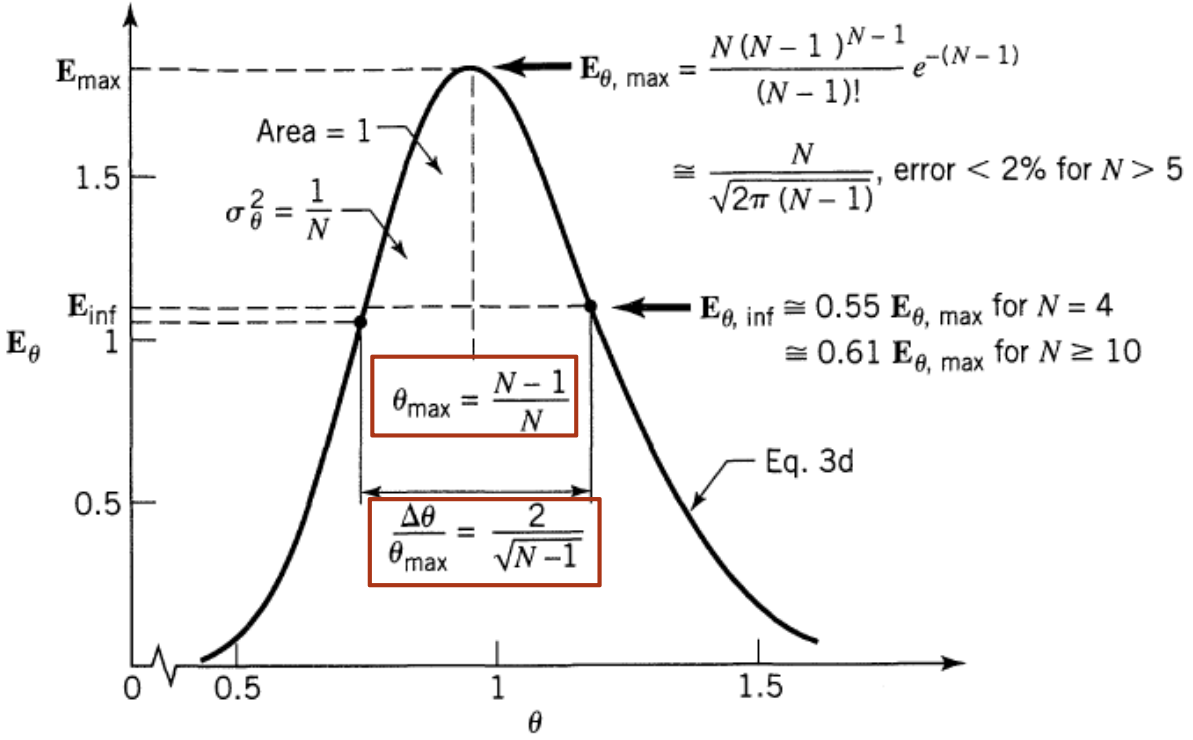
زمان اقامت متوسط در Nراکتور متساوی الحجم سری : $\bar{t} = N . \bar{t}_i \rightarrow \theta = \frac{t}{\bar{t}} = \frac{t}{N . \bar{t}_i} = \frac{\theta_i}{N} \rightarrow \theta_i = N\theta$

$$E_\theta = \bar{t} . E = N . \bar{t}_i . E = N \frac{{\theta_i}^{N-1}}{(N-1)!} . e^{-\theta_i} \rightarrow E_\theta = N(N\theta)^{N-1} . \frac{1}{(N-1)!} . e^{-N\theta} \xrightarrow{N=1} \begin{cases} \theta = \theta_i \\ E_{\theta_i} = E_\theta = e^{-\theta} \end{cases}$$


2.0
1.5
1.0
0.5
0
E_θ
N = 20
10
5
3
2
N = 1
0
0.5
1.0
$\theta = \frac{t}{N\bar{t}_i} = \frac{t}{\bar{t}}$
1.0
0.5
0
E_{θ_i}
N = 1
2
3
4
N = 5
0
1
2
3
4
$\theta_i = \frac{t}{\bar{t}_i}$

اگر یکی از این منحنی‌ها را در نظر بگیریم اطلاعات زیر را می‌توان استخراج کرد.

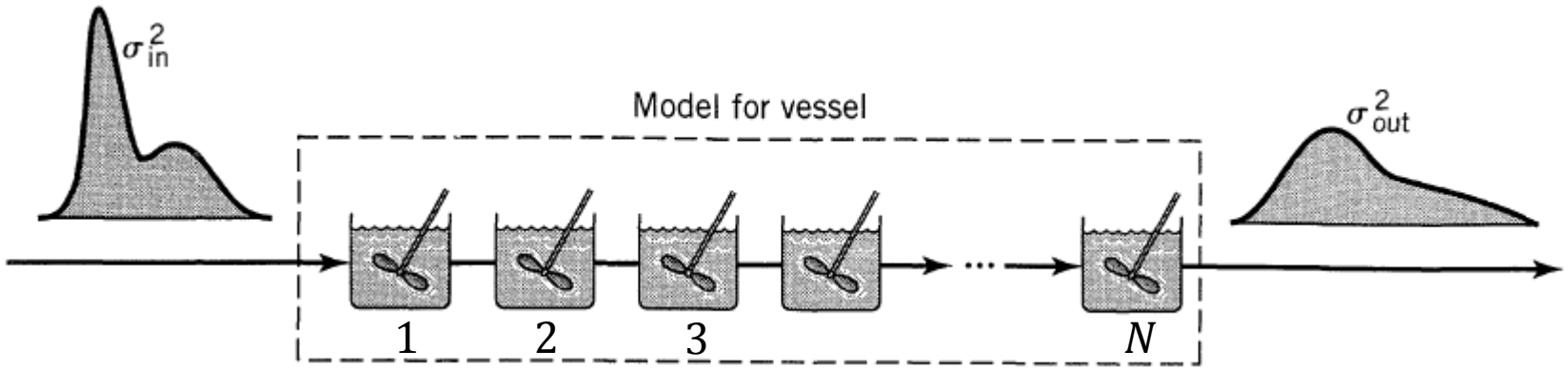
RTD برای N راکتور همزده سری



$$\begin{cases} N = 1 \rightarrow \theta_{max} = 0 \\ N = \infty \rightarrow \theta_{max} = 1 \end{cases}$$

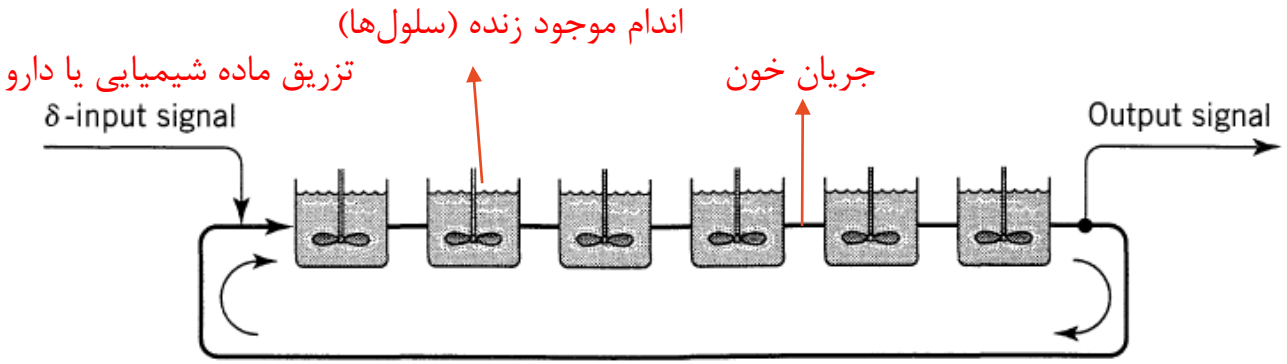
مدل چند راکتوری $\sigma_\theta{}^2 = \frac{1}{N}$

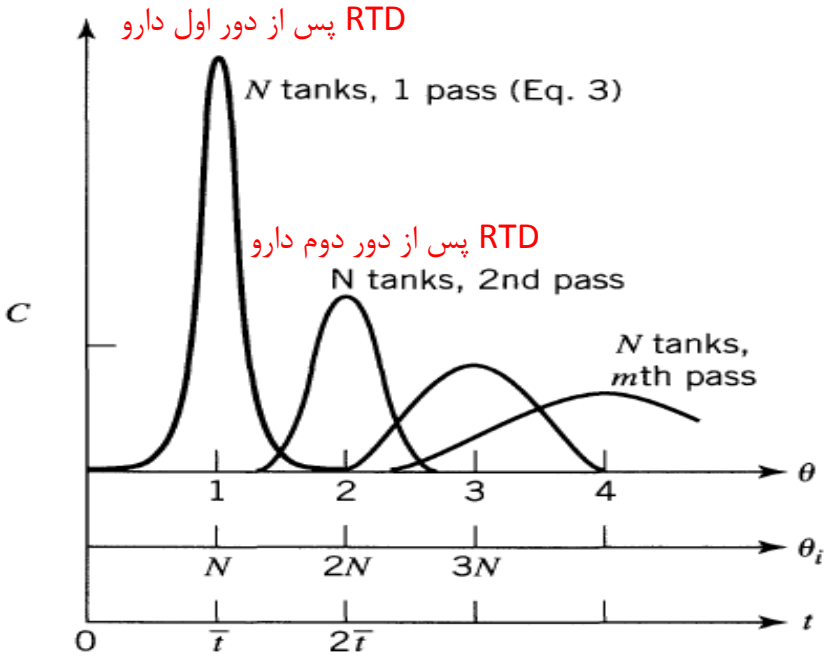
مدل پراکنده $\sigma_\theta{}^2 = \frac{2D}{uL}$



محاسبه $\Delta\sigma^2 = \sigma^2{}_{out} - \sigma^2{}_{in} = \frac{\bar{t}^2}{N}$ → تعیین N

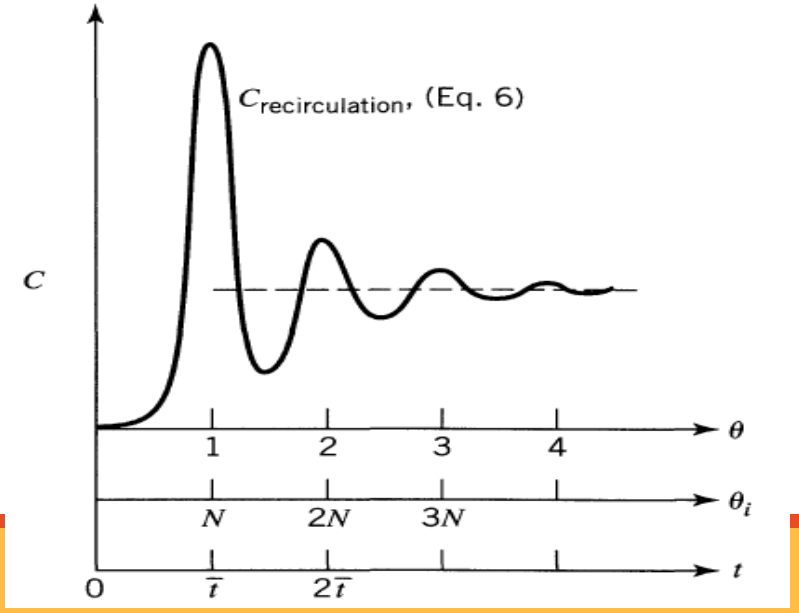
کاربرد این مدل بیشتر در مدل‌سازی اندام موجودات زنده می‌باشد. (سیستم‌های دوره‌ای بسته: مثلاً در شیمی درمانی)





$\bar{t}$: زمان اقامت متوسط سیال در دور اول (پس از عبور از N مخزن)

اگر غلظت توسط ناظری اندازه‌گیری شود، ناظر مجموعه‌ای از منحنی‌ها را بصورت روبرو مشاهده می‌کند:



تغییرات غلظت پس از یک بار گذر از N راکتور:

همان E

$$\bar{t}_i.\mathbb{C} = \left(\frac{t}{\bar{t}_i}\right)^{N-1} . \frac{1}{(N-1)!} e^{-t/\bar{t}_i}$$

عکس‌العمل بدست آمده از تابع دلتا پس از یک بار گذر از N راکتور:

تعداد چرخش $m = 1: \quad \mathbb{C}_{\theta_i} = \theta_i^{N-1} . \frac{1}{(N-1)!} e^{-\theta_i}$

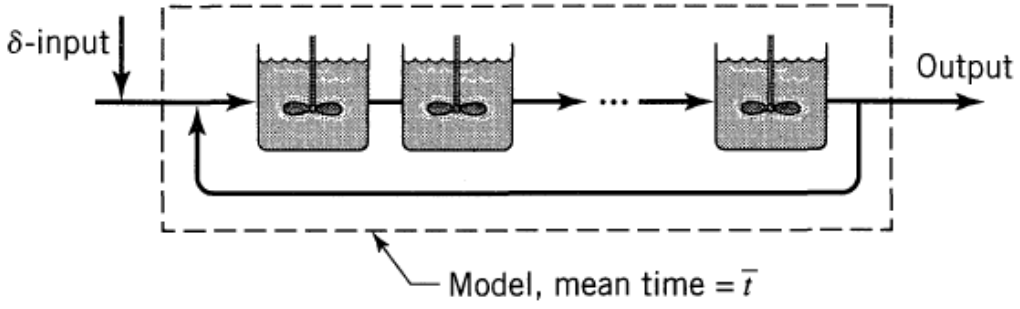
عکس‌العمل حاصل از تزریق تابع دلتا پس از m بار چرخش:

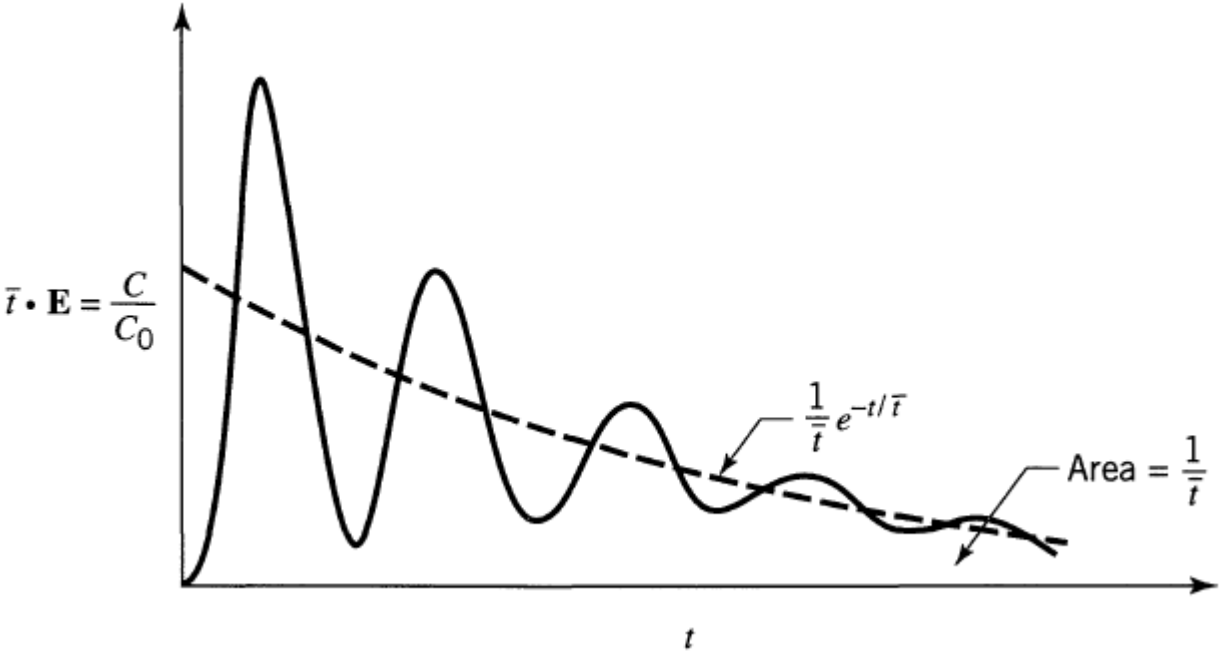
$$m = m: \quad \mathbb{C}_{\theta_i} = \theta_i^{mN-1} . \frac{1}{(mN-1)!} e^{-\theta_i}$$

بنابراین عکس‌العمل حاصل از تابع دلتا پس از m بار پرخش که توسط ما قابل رؤیت است عبارت است از جمع تمام عکس‌العمل‌ها.

$$\mathbb{C}_{\theta_i} = e^{-\theta_i} \sum_{m=1}^{m} \frac{\theta_i^{mN-1}}{(mN-1)!}$$

حال اگر یک جریان خروجی با دبی کم در مقابل جریان برگشتی داشته باشیم:





رفتار سیستم شبیه یک راکتور همزده می‌شود. این کاهش غلظت می‌تواند در اثر جریان خروجی (ادرار) باشد یا در اثر واکنش شیمیایی (جذب دارو، شکسته شدن مولکول‌های دارو و عوامل سرطان‌زا).

مثال: میزان تبدیل در راکتور مثال ۱ را با فرض مدل مخازن پشت سرهم بدست آورید.

$$(-r_A) = kC_A \qquad k = 0.307\ min^{-1} \qquad \tau_P = \bar{t} = 15\ min$$

مدل مخازن پشت سرهم ؟

مدل پراکندگی : $\frac{C_{A,out}}{C_{A0}} = 0.035$

روش مستقیم (بدون مدل) : $\frac{C_{A,out}}{C_{A0}} = 0.047$

از مثال ۳ : $\sigma_\theta{}^2 = 0.211$

$$\sigma_\theta{}^2 = \frac{1}{N} = 0.211 \rightarrow N = 4.76$$

برای عملیات ۵ مخرن در نظر می‌گیریم ولی از نظر ریاضیاتی مهم نیست.

از قبل داشتیم : $$\frac{C_{A,out}}{C_{A0}} = \frac{1}{(1+k\tau_i)^N} = \frac{1}{\left(1 + 0.307 \times \frac{15}{4.76}\right)^{4.76}} = 0.040$$