طراحی راکتور پیشرفته

مرجع: طراحی راکتورهای شیمیایی، لون اشپیل

ترجمه دکتر سهرابی

Ref.: Chemical Reaction Engineering, Levenspiel

مدرس: یگانه داودبیگی

(جلسه یازدهم)

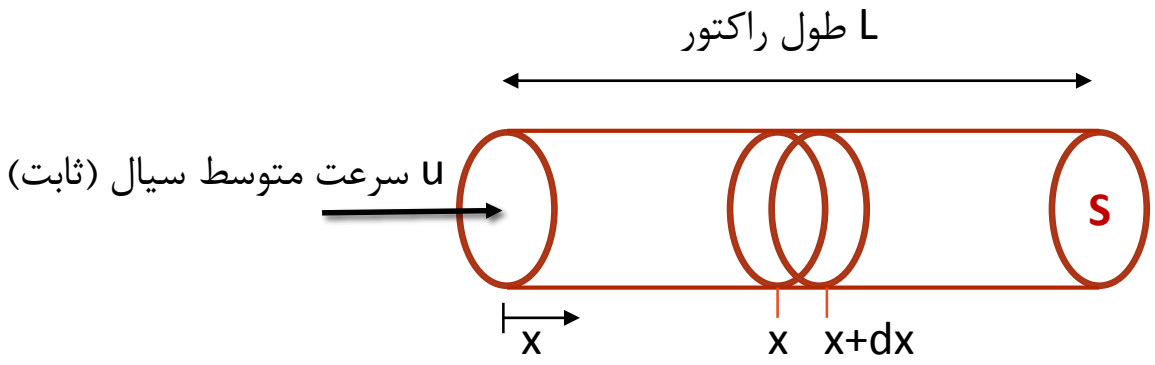
واکنش شیمیایی و پراکندگی:

حال اگر در ظرف واکنش شیمیایی انجام گیرد میخواهیم ببینیم عامل پراکندگی (D) چه اثری روی میزان تبدیل در راکتور دارد.

فرضیات:

۱) اختلاط فقط در جهت محوری با ضریب پراکندگی D،

۲) واکنش درجه n ساده $A \rightarrow R + S + \cdots \qquad -(r_A) = kC_A{}^n$



موازنه جرم A در واحد زمان:

تجمع در المان = تعداد مول A واکنش داده در المان − تعداد مول A خروجی از المان − تعداد مول A ورودی به المان

$$\left[(u.S.C_A)_x + \left(-D.S.\frac{dC_A}{dx}\right)_x\right] - \left[(u.S.C_A)_{x+dx} + \left(-D.S.\frac{dC_A}{dx}\right)_{x+dx}\right] - (-r_A).S.dx = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{D\frac{d^2C_A}{dx^2} - u\frac{dC_A}{dx} - kC_A{}^n = 0}$$

اگر واکنش درجه صفر باشد:

با حل معادله با در نظر گرفتن واکنش درجه صفر و در نظر گرفتن شرایط مرزی خواهیم داشت: $C_{A,out} = C_{A0} - k\bar{t}$

که همان رابطه‌ای است که در یک راکتور Plug ایده‌آل و همچنین mixed ایده‌آل داشتیم. در واقع واکنش درجه صفر تابع جریان سیال نیست و در هر راکتوری نتیجه‌ای واحد حاصل می‌گردد.

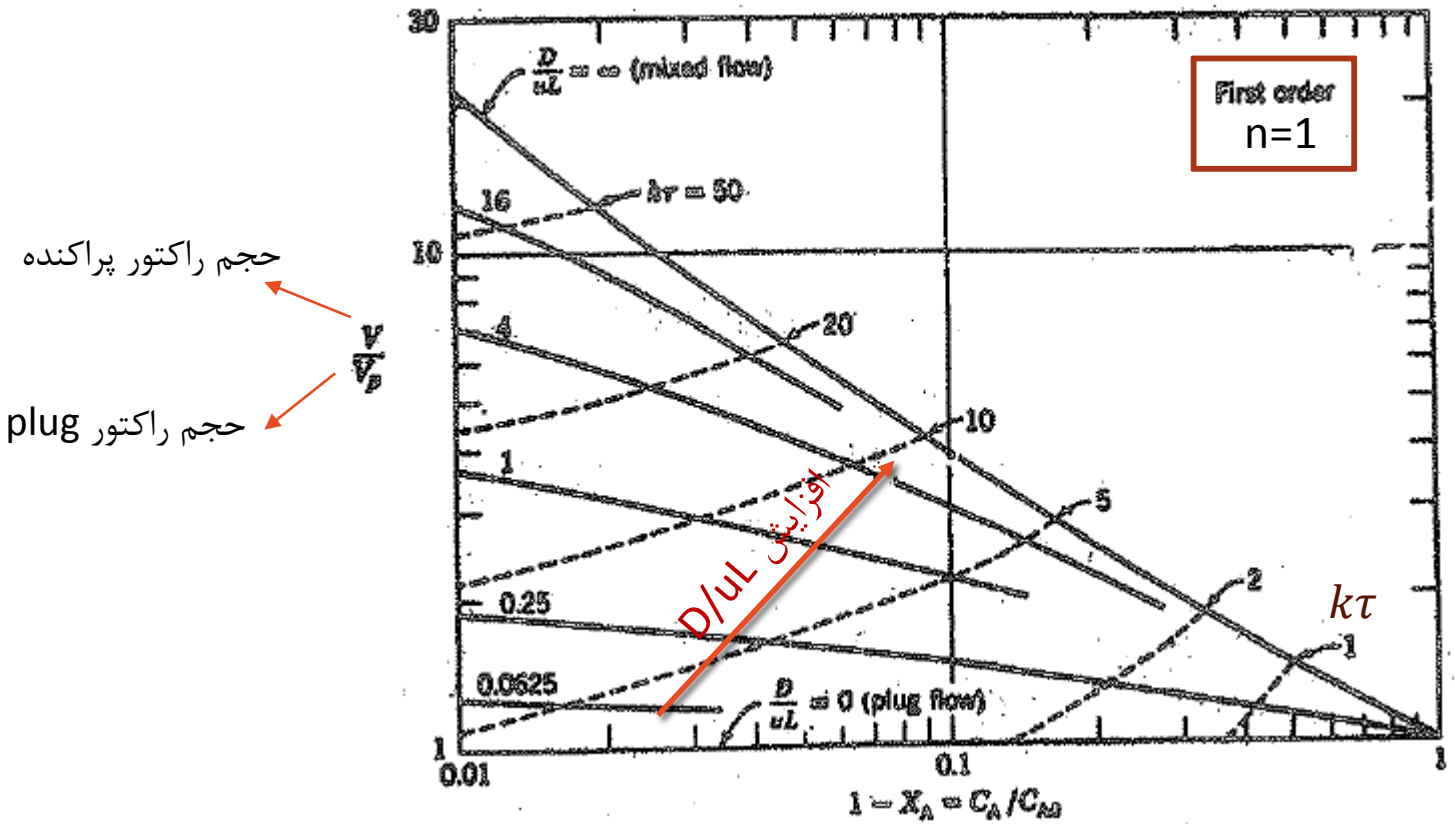
اگر واکنش درجه یک باشد:

برای واکنش‌های بالاتر از درجه صفر، روش تحلیلی مشکل شده و روش ترسیمی ترجیح داده می‌شود.

Wilhem و Wehner یک جل جبری برای ظروف بسته ارائه داده‌اند:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = 1 - X_A = \frac{4a \exp\left(\frac{1}{2}\frac{uL}{D}\right)}{(1+a)^2 \exp\left(\frac{a}{2}\frac{uL}{D}\right) - (1-a)^2 \exp\left(-\frac{a}{2}\frac{uL}{D}\right)} \qquad a = \sqrt{1 + 4k\tau(D/uL)}$$

از ترکیب معادله فوق و معادله مربوط به راکتور plug ایده‌آل که در آن $\tau_P = \frac{V_P}{Q} = C_{A0}\int_0^x \frac{dx}{-(r_A)}$، می‌توان نسبت حجم راکتور حقیقی به راکتور plug ایده‌آل را بدست آورد.



در صورت وجود انحراف جزیی از حالت پلاگ، D/uL کوچک بوده و بنابراین پس از بسط معادله ارائه شده توسط ونر و ویلهم و در نظر گرفتن دو جمله از آن خواهیم داشت:

$$Dispersion\ plug\ flow:\ \frac{C_{A,out}}{C_{A0}} = 1 - x_A = exp\left[-k\tau + (k\tau)^2\frac{D}{uL}\right] \quad , \qquad n = 1$$

$$plug\ flow: \frac{D}{uL} = 0 \ \rightarrow \ \frac{C_{A,out,P}}{C_{A0}} = \exp(-k\tau_P)$$

از تساوی غلظت‌ها $$-k\tau_P = -k\tau + (k\tau)^2\frac{D}{uL} \rightarrow \frac{\tau}{\tau_P} = \frac{k\tau^2}{\tau_P}\left(\frac{D}{uL}\right) + 1$$

اگر فرض کنیم $\tau = \tau_P$ (اعمال یک تقریب در معادله): $$\frac{\tau}{\tau_P} = k\tau\left(\frac{D}{uL}\right) + 1$$

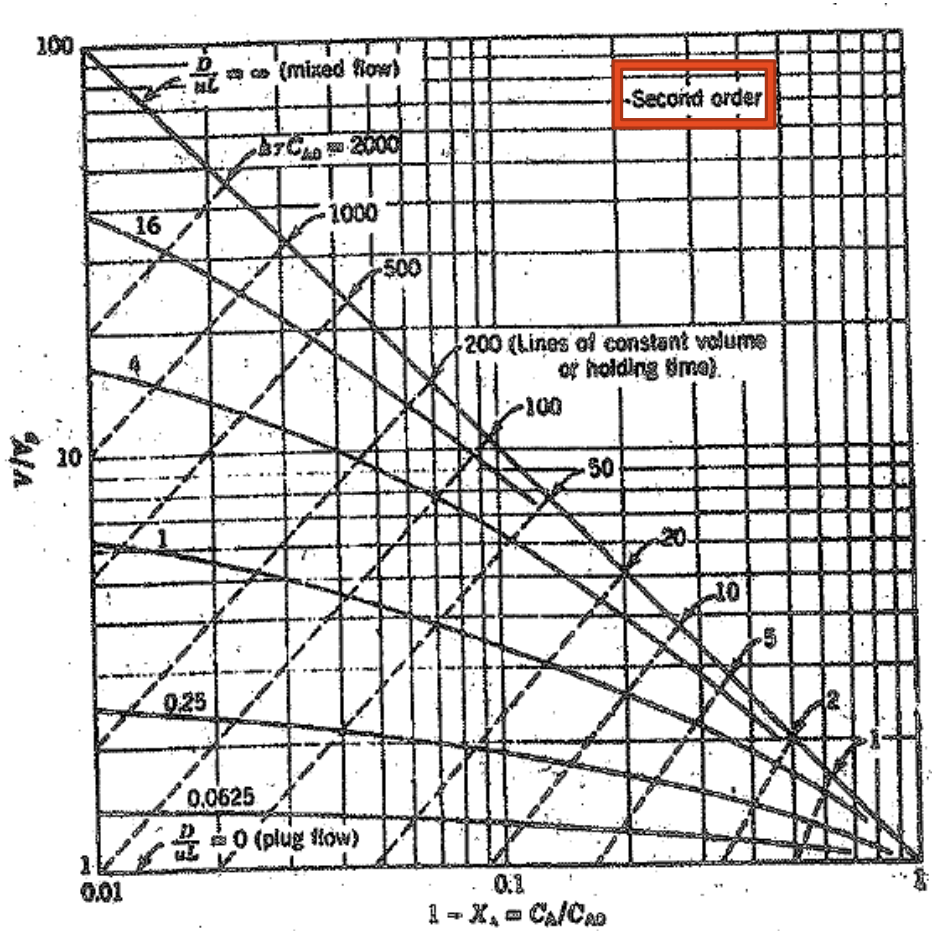
بنابراین نسبت حجمی دو راکتور جهت غلظت یکسان در خروجی با فرض برابر بودن Q در دو راکتور: $$\frac{V}{V_P} = \frac{L}{L_P} = 1 + (k\tau)\frac{D}{uL}$$

* در صورتی که حجم دو راکتور یکسان باشد ($\tau = \tau_P$) و Q نیز برابر باشد خواهیم داشت:

$$\frac{C_{A,out}}{C_{A,\mathrm{out,P}}} = \frac{exp\left[-k\tau + (k\tau)^2\frac{D}{uL}\right]}{\exp\left(-k\tau_P\right)} = \cdots = \ 1 + (k\tau)^2\frac{D}{uL}$$

اگر واکنش درجه دو باشد:

برای واکنش‌های درجه دوم از نوع $A + B \rightarrow products$ یا $2A \rightarrow products$ با فرض $C_{A0} = C_{B0}$، نموداری مانند نمودار مربوط به واکنش درجه اول ارائه شده است.



اگر واکنش درجه n باشد:

برای واکنش‌های درجه n(بالاتر از درجه دو) دو روش وجود دارد:

۱) می‌توان نتایج را با استفاده از شکل‌های مربوط به درجه یک و دو، برون‌یابی کرد.

۲) Pasquon و Dente برای انحرافات جزئی از حالت پلاگ، با هر نوع معادله سرعتی از درجه n، رابطه زیر را ارائه دادند:

$$\frac{C_{A,out}}{C_{A,\mathrm{out,p}}} = 1 + n\left(\frac{D}{uL}\right)(k{C_{A0}}^{n}\tau)ln\frac{C_{A0}}{C_{A,out,P}}$$

* جهت درصد تبدیل یکسان در خروجی راکتورها با فرض Q یکسان داریم: $V_P < V_{real} < V_m$

* اگر حجم راکتورها و Q یکسان باشد داریم: $x_P > x_{real} > x_m$

مثال ۶: محاسبه میزان تبدیل با استفاده از مدل پراکندگی:

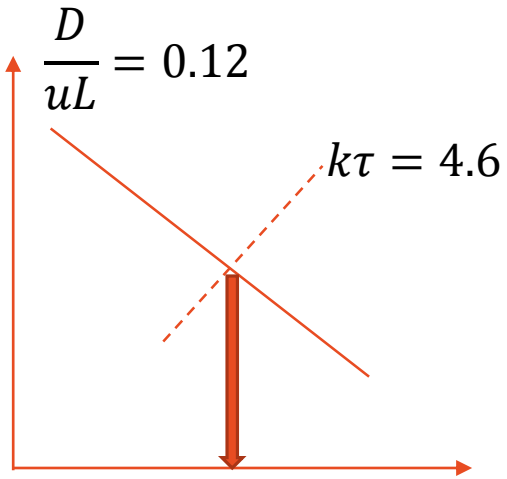
میزان تبدیل خروجی از راکتور مثال ۱ را با استفاده از مدل پراکندگی محاسبه کنید و با مقدار بدست آمده از منحنی توزیع زمان اقامت (مثال ۲) مقایسه کنید.

$$\bar{t} = 15\ min$$

$$plug: \frac{C_{A,out,P}}{C_{A0}} = 0.01$$

از منحنی توزیع زمان اقامت

$$\begin{cases} \dfrac{C_{A,out,real}}{C_{A0}} = 0.047 \\ \dfrac{D}{uL} = 0.12\ , k\tau = (0.307)(15) = 4.6 \end{cases}$$



$$\left(\frac{C_{A,out}}{C_{A0}}\right)_{Dispersion\ model} = 0.035$$

مساله ۹-۹: گازی در یک راکتور لوله‌ای با جریان آرام تبدیل می‌شود. می‌خواهیم در دمای ثابت میزان تولید را ۴ برابر کنیم، برای این منظور دو روش پیشنهاد شده است:

الف) ۴ برابر کردن طول راکتور بدون تغییر در قطر آن،

ب) ۲ برابر کردن قطر راکتور بدون تغییر در طول آن.

در هر دو میزان انحراف را از راکتور plug بدست آورید و بگویید کدام یک از این دو روش مناسب‌تر است؟

فرض کنید جریان آرام در هر دو مورد برقرار است و طول راکتور به اندازه کافی زیاد است که مدل پراکندگی برای آن صادق است.

از آنجا که جریان آرام است و فاز گازی می‌باشد پس می‌توانیم مقادیری را برای اعداد Re و Sc در نظر بگیریم.

$$Re = 200, \qquad Sc = 0.25$$

می‌خواهیم در درصد تبدیل ثابت، میزان تولید را ۴ برابر کنیم.

راکتور پلاگ ایده‌آل $\tau_P = \frac{V}{Q} = \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{-dC_A}{(-r_A)}$

ثابت

۴ برابر

چون τ ثابت است پس حجم راکتور را باید ۴ برابر کنیم.

$$V = \frac{\pi {d_t}^2}{4} . L$$

طول را ۴ برابر کنیم

یا

قطر را ۲ برابر کنیم

الف) در قطر ثابت طول را ۴ برابر می‌کنیم. $L' = 4L$

حالت اول $Re.Sc = 200 \times 0.25 = 50 \xrightarrow{\text{نمودار}} \frac{D}{u.d_t} = 0.2 \rightarrow \frac{D}{u.L} = \frac{D}{u.d_t}.\frac{d_t}{L} \rightarrow \frac{D}{u.L} = 0.2\frac{d_t}{L}$

حال در قطر ثابت طول را ۴ برابر کرده و زمان اقامت را ثابت نگه می‌داریم.

$$\bar{t}_1 = \bar{t}_2$$

$$\frac{L}{u} = \frac{L'}{u'} \rightarrow \frac{L}{u} = \frac{4L}{u'} \rightarrow u' = 4u$$

$$Re' = \frac{\rho.u'.d_t}{\mu} = 4\frac{\rho.u.d_t}{\mu} = 4 \times 200 = 800$$

$Re'.Sc = 800 \times 0.25 = 200 \xrightarrow{\text{نمودار}}$ عدد پراکندگی جدید $\frac{D}{u'.L'} = \frac{D}{u'.d_t}.\frac{d_t}{L'} = 0.9 \times \frac{d_t}{4L} \approx 0.2\frac{d_t}{L}$

تقریبا همان عدد پراکندگی راکتور اصلی

ب) در طول ثابت قطر را دو برابر کنیم (زمان اقامت متوسط ثابت)

$$\bar{t}_1 = \bar{t}_2 = cte = \frac{L}{u}$$

L ثابت است پس u نیز باید ثابت باشد. $\longrightarrow$ $L' = L \ , u' = u$

$$Re' = \frac{\rho . u . d'_t}{\mu} = \frac{\rho . u . (2d_t)}{\mu} = 2Re = 400$$

$$Re' . Sc = 400 \times 0.25 = 100 \xrightarrow{\text{نمودار}}$$ عدد پراکندگی جدید $$\frac{D}{u . L} = \frac{D}{u . d'_t} . \frac{d'_t}{L} = 0.4 \times \frac{2d_t}{L} = 0.8 \frac{d_t}{L} = 4\left(0.2 \frac{d_t}{L}\right)$$

۴ برابر عدد پراکندگی قدیم

* پس روش بهتر این است که طول را زیاد کنیم و اگر قطر دو برابر شود به سمت همزده می‌رود.