

مسال ۳: در مثال قبلی فرض کنید که ثابت تعادل واکنش اول در دمای ۱۰۵۰ کلوین و دمای ۱۰۰۰ کلوین برابر است.

خوبه از آنجا که واکنش اول در دمای ۱۰۵۰ کلوین و دمای ۱۰۰۰ کلوین برابر است.

واکنش دوم: $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$, $K_1 = 94.2$, $K_2 = 1.2$

فرضیات: $P^0 = 1 \text{ atm}$, $n_{CH_4, in} = 50 \text{ kmol/hr}$, $n_{H_2O, in} = 125 \text{ kmol/hr}$

در دمای ۱۰۵۰ کلوین و دمای ۱۰۰۰ کلوین برابر است.

واکنش ها در دمای ۱۰۵۰ کلوین و دمای ۱۰۰۰ کلوین برابر است.

میزان پیشرفت واکنش اول و دوم ξ_1, ξ_2

$$\begin{cases} n_{H_2O, out} = 125 - \xi_1 - \xi_2 \\ n_{CH_4, out} = 50 - \xi_1 \\ n_{H_2, out} = 0 + 3\xi_1 + \xi_2 \end{cases} \quad \begin{cases} n_{CO, out} = \xi_1 - \xi_2 \\ n_{CO_2, out} = \xi_2 \\ n_{total, out} = 175 + 2\xi_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{H_2O, out} = \frac{125 - \xi_1 - \xi_2}{175 + 2\xi_1} \\ y_{CH_4, out} = \frac{50 - \xi_1}{175 + 2\xi_1} \end{cases} \quad \begin{cases} y_{H_2, out} = \frac{3\xi_1 + \xi_2}{175 + 2\xi_1} \\ y_{CO, out} = \frac{\xi_1 - \xi_2}{175 + 2\xi_1} \\ y_{CO_2, out} = \frac{\xi_2}{175 + 2\xi_1} \end{cases} \quad (I)$$

$$\begin{cases} K_1 = \frac{a_{CO} a_{H_2}^3}{a_{CH_4} a_{H_2O}} \approx \frac{P_{CO} P_{H_2}^3}{P_{CH_4} P_{H_2O}} = \frac{y_{CO} y_{H_2}^3}{y_{CH_4} y_{H_2O}} P^2 \\ K_2 = \frac{a_{CO_2} a_{H_2}}{a_{CO} a_{H_2O}} \approx \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{P_{CO} P_{H_2O}} = \frac{y_{CO_2} y_{H_2}}{y_{CO} y_{H_2O}} \end{cases} \quad (II)$$

با جایگزینی معادلات (I) در (II) داریم:

$$\begin{cases} (\xi_1 - \xi_2) (3\xi_1 + \xi_2)^3 \times 25 - 94.2 (50 - \xi_1) (125 - \xi_1 - \xi_2) (175 + 2\xi_1)^2 = 0 \\ \xi_2 (3\xi_1 + \xi_2) - 1.2 (\xi_1 - \xi_2) (125 - \xi_1 - \xi_2) = 0 \end{cases}$$

با حل دستگاه غیرخطی فوق بکبک تابع $f = \text{solve.m}$ در نرم افزار MATLAB داریم:

$$\xi_1 = 44.42, \xi_2 = 15.33 \Rightarrow \begin{cases} n_{H_2O} = 65.25, n_{CH_4} = 5.58, n_{CO} = 29.09 \\ n_{CO_2} = 15.33, n_{H_2} = 148.59 \end{cases}$$

که در فایل $\langle \text{SMR-ER.m} \rangle$ آمده است.