بنام خدا

دانشگاه فردوسی مشهد – دانشکده مهندسی- گروه مهندسی شیمی

تکلیف ششم درس فرآیندهای پتروشیمی

داده های آزمایشگاهی مقدار تبدیل (X)، وزن ملکولی متوسط عددی(MWN) و وزن ملکولی متوسط وزنی (MWW) کوپلیمر استایرن-متیل متکریلات در یک رآکتور ناپیوسته در دمای 60 °C ، فشار 1.0 atm، کسر مولی استایرن برابر با 0.3 و در حضور آغازگر AIBME (وزن ملکولی برابر با 230.26) با غلظت 0.01 M در مرجع زیر ارائه شده است(Bulk copolymerization):

A. Keramopoulos and C. Kiparissides, "Development of a Comprehensive Model for Diffusion-Controlled Free-Radical Copolymerization Reactions", *Macromolecules* **2002,** *35*, 4155-4166.

داده های آزمایشگاهی استخراج شده از مقاله فوق در جدول (۱) ارائه شده اند.

جدول(۱): داده های آزمایشگاهی

وزن ملکولی متوسط وزنی (MWW) Std-Dev = 5%	وزن ملکولی متوسط عددی(MWN) Std-Dev = 5%	مقدار تبدیل(X) Std-Dev = 0.01	زمان (ساعت) Std-Dev = 0.01
240137	142670	0.1	2.5305
263397	156485	0.185	5.0134
274113	162852	0.27	7.0986
307862	162313	0.347	9.1826
378363	188369	0.388	10.574
472032	207554	0.464	11.611
493130	208698	0.5	12.105
699996	260401	0.583	12.6416
912020	260879	0.68	13.0262
1096695	319757	0.83	13.5534
1202788	344052	0.911	14.5892

مدل سنتیکی فرآیند مذکور نیز در مقاله فوق (بدون در نظر گرفتن محدودیت های نفوذ) بصورت زیر ارائه شده است.

$$\text{Initiator Decomposition}: K_d\left(\frac{1}{\text{s}}\right) = 2.372\times10^{14}\exp\left(\frac{-2.941\times10^{4}}{RT}\right),\ \text{Initiator Efficiency} = 0.5$$

$$\text{Chain Initiations}: K_{I1} = K_{p11},\ K_{I2} = K_{p22},\ R\left(\frac{\text{cal}}{\text{mol K}}\right) = 1.9872$$

$$\text{Propagations}: \begin{cases} K_{p11}\left(\dfrac{\text{m}^3}{\text{kmol s}}\right) = 1.09\times10^{7}\exp\left(\dfrac{-7051}{RT}\right) \\ K_{p22}\left(\dfrac{\text{m}^3}{\text{kmol s}}\right) = 4.917\times10^{5}\exp\left(\dfrac{-4353}{RT}\right) \\ K_{p12} = \dfrac{K_{p11}}{r_1},\ K_{p21} = \dfrac{K_{p22}}{r_2},\ r_1 = 0.52,\ r_2 = 0.46 \end{cases}$$

$$\text{Termination-Dis}: K_{td22}\left(\frac{\text{m}^3}{\text{kmol s}}\right) = 9.8\times10^{7}\exp\left(\frac{-701}{RT}\right),\ K_{td11} = K_{td12} = K_{td21} = 0$$

$$\text{Termination-Com}: \begin{cases} K_{tc11}\left(\dfrac{\text{m}^3}{\text{kmol s}}\right) = 1.255\times10^{9}\exp\left(\dfrac{-1677}{RT}\right),\ K_{tc22} = 0 \\ K_{tc12} = K_{tc21} = \phi_t\left[2\sqrt{K_{tc11}K_{td22}}\right],\ \phi_t = 25.0 \end{cases}$$

مدل پدیده ژل برای واکنشهای پایانی (Termination Gel-Effect) را نیز از نوع دوم با پارامترهای ارائه شده در جدول (۲) در نظر بگیرید.

جدول (۲): پارامترهای مدل ژل واکنش های پایانی

a1	a2	a3	a4	a5
1.3	0.0	2.8	-0.005	16.1
a6	**a7**	**a8**	**a9**	**a10**
-0.018	-5.4	0.008	1.1	1.5

۱- نمودارهای مقادیر پیش بینی شده توسط مدل (قبل از رگراسیون) همراه با مقادیر آزمایشگاهی را گزارش کنید. در نمودار اول مقدار تبدیل (X) را بر حسب زمان و در نمودار دوم مقادیر وزن ملکولی(MWN و MWW) را بر حسب مقدار تبدیل رسم کنید (محور عمودی نمودار وزن ملکولی را لگاریتمی در نظر بگیرید).

۲- مدل سنتیکی را توسط زیر مجموعه Regression نرم افزار اصلاح کنید. رگراسیون را بگونه ای انجام دهید تا مقدار تابع هدف کمتر از ۵۰ حاصل شود.

Absolut Function Tolerance = 50

مقادیر نهائی تابع هدف وپارامترهای مدل سنتیکی را پس از رگراسیون گزارش کنید.

۳- نمودارهای مقادیر پیش بینی شده توسط مدل (پس از رگراسیون) همراه با مقادیر آزمایشگاهی را گزارش کنید.

مهلت : دو هفته **موفق باشید**