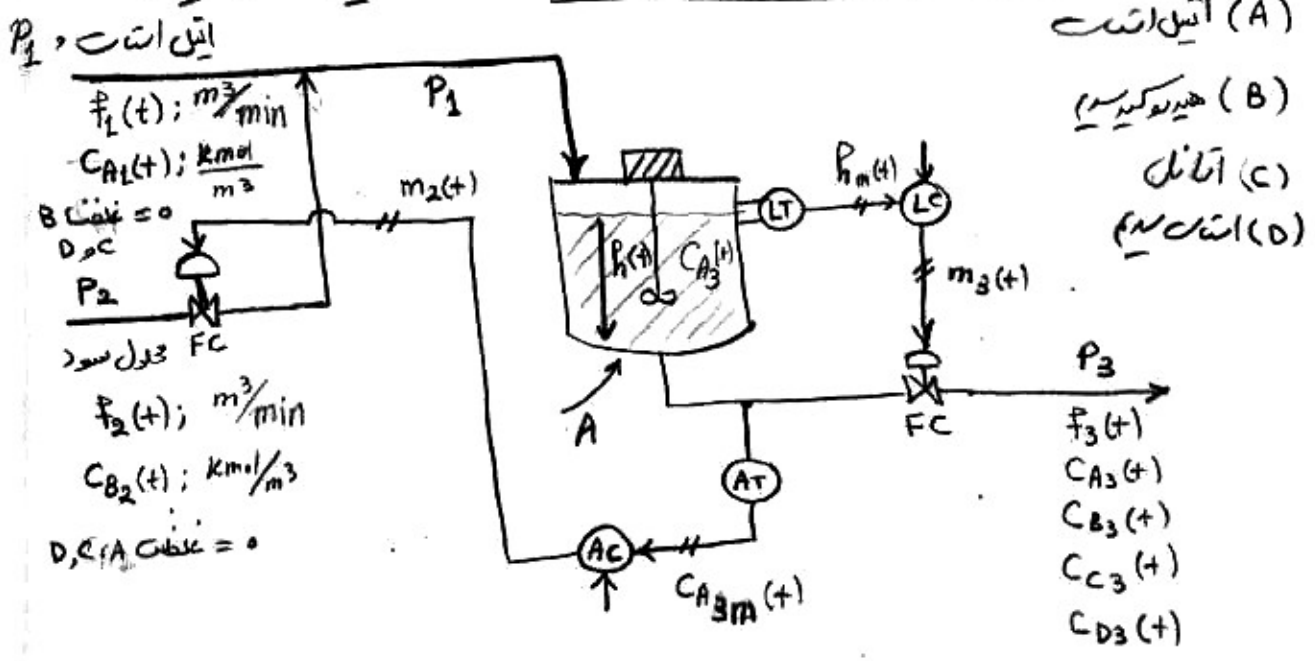
## مثال چهارم مدلسازی (موازنه جرم جزء همراه با واکنش شیمیایی) : راکتور زیر را در نظر بگیرید




در راکتور فوق اتیل استات با هیدروکسید سدیم در محیط آبی واکنش داده و تولید آتانول و استات سدیم می‌نماید، واکنش فوق کلی بصورت زیر است:

$$A + B \longrightarrow C + D$$

واکنش فوق ابتدائی بوده و سرعت آن بصورت زیر داده شده است (دردمای ثابت 30 درجه سانتیگراد):

$$r_K = k C_A C_B \quad , \quad k = 8.90 \ \frac{m^3}{(kmol)(min)} \quad , \quad r_K = \frac{kmol}{(m^3)(min)}$$

- مابقی مشخصات راکتور بصورت زیر داده شده است:

قطر راکتور = 1.0 m ، حداقل ارتفاع قابل قبول در راکتور = 0.5 m ، فشار خوراک اتیل استات ($P_1$) = 200 kpa

حداکثر ارتفاع مایع داخل راکتور = 1.5 m ، ارتفاع نامی سیال در راکتور = 1.0 m ، فشار محصول خروجی ($P_3$) = 145 kpa

فشار خوراک سود ($P_2$) = 270 kpa ،

با توجه به اینکه جزء اصلی در کلیه جریانها آب میباشد، لذا متوسل شده و دانسیته مولی و وزنی جریانها را همانند آب خالص در نظر گرفته و لذا داریم: $sp.gr \simeq 1.0$ ، دانسیته وزنی کلیه جریانها $\simeq 995 \ kg/m^3$

دانسیته مولی کلیه جریانها $\simeq 55 \ kmol/m^3$

- سنسور سطح دارای دینامیک ناچیز و رفتار خطی با محدوده ($h_{max}=1.5^m$ , $h_{min}=0.5^m$).
- سنسور غلظت دارای ثابت زمانی $1.0\,min$ و تأخیر زمانی $3.0\,min$ و رفتار خطی و محدوده کالیبراسیون $0$ تا $0.1\ \frac{kmol}{m^3}$ می‌باشد.

- مقادیر ناحیه متغیرهای ورودی و خروجی نیز مطابق زیر داده شده است:

$$\bar{m}_2 = \bar{m}_3 = 50\%$$

$$\bar{F}_1 = 1.59\ \frac{m^3}{min}\ ,\quad \bar{C}_{A1} = \bar{C}_{B2} = 0.1\ \frac{kmol}{m^3}\ ,\quad \bar{C}_{B1} = \bar{C}_{A2} = 0$$

- شیرهای کنترل دارای رفتار خطی، دینامیک ناچیز و عملکرد FC و با ضرایب ظرفیت مطابق زیر

$$C_{v_{2max}} = 0.3801\ \frac{m^3/min}{\sqrt{kPa}}$$

$$C_{v_{3max}} = 0.7903\ \frac{m^3/min}{\sqrt{kPa}}$$

* * *

معادلات مدل ارائه داده شده است. با حل معادلات مدل در حالت پایا و ارائه تغییرات ناحیه غلظت و ارتفاع را محاسبه نمود.

$$\bar{h} = 1.0^m$$

$$\bar{C}_{A3} = \bar{C}_{B3} = 0.0454\ \frac{kmol}{m^3}$$

- معادله جرم کل:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{(f_1 + f_2 - f_3)}{A} \quad (1) \qquad \text{(I)}$$

با توجه به اینکه A ثابت است

- معادله جرم جزء A: (مولی)

$$\frac{d(C_{A_3} A h)}{dt} = f_1 C_{A1} + f_2 C_{A_2} - f_3 C_{A_3} - k C_{A_3} C_{B_3} A h$$

$$\Rightarrow h \frac{dC_{A_3}}{dt} + C_{A_3} \frac{dh}{dt} = \frac{1}{A}(f_1 C_{A_1} + f_2 C_{A_2} - f_3 C_{A_3}) - k C_{A_3} C_{B_3} h \quad (2)$$

$$(1),(2) \Rightarrow \frac{dC_{A_3}}{dt} = \frac{1}{Ah}\{f_1(C_{A_1} - C_{A_3}) + f_2(C_{A_2} - C_{A_3})\} - k C_{A_3} C_{B_3} \quad (3) \qquad \text{(II)}$$

- معادله جرم جزء B:

$$\frac{d(C_{B_3} A h)}{dt} = f_1 C_{B_1} + f_2 C_{B_2} - f_3 C_{B_3} - k C_{A_3} C_{B_3} A h$$

$$\Rightarrow h \frac{dC_{B_3}}{dt} + C_{B_3} \frac{dh}{dt} = \frac{1}{A}(f_1 C_{B_1} + f_2 C_{B_2} - f_3 C_{B_3}) - k C_{A_3} C_{B_3} h \quad (4)$$

$$(1),(4) \Rightarrow \frac{dC_{B_3}}{dt} = \frac{1}{Ah}\{f_1(C_{B_1} - C_{B_3}) + f_2(C_{B_2} - C_{B_3})\} - k C_{A_3} C_{B_3} \quad (5) \qquad \text{(III)}$$

- دبی عبوری از شیر کنترل ۲:
فرض: $P_1 < P_2$

$$f_2(t) = C_{v_{2max}} \left(\frac{m_2(t)}{100}\right) \sqrt{\frac{(P_2 - P_1)}{sp.gr}} \quad (IV)$$

- دبی عبوری از شیر کنترل ۳:

$$f_3(t) = C_{v_{3max}} \left(\frac{m_3(t)}{100}\right) \sqrt{\frac{(P_1 + \rho g h/1000) - P_3}{sp.gr}} \quad (V)$$

- سنسورها: VII

$$h_m(t) = \left(\frac{h(t) - h_{min}}{h_{max} - h_{min}}\right) 100 \qquad \tau_m \frac{dC_{A_{3m}}}{dt} + C_{A_{3m}}(t) = \left(\frac{C_{A_3}(t - t_0) - C_{A_{3min}}}{C_{A_{3max}} - C_{A_{3min}}}\right) 100$$

(VI) (VII)

بنابراین معادلات دیفرانسیل (I) ، (II) ، III ، VII ، معادلات جبری IV ، V ، VI مثال ذکر شده مدل فرآیند و بازگشت. چنانکه گفته شد هر کدام فرآیند فوق دارای

چهار متغیر حالت: $x^T = [h, C_{A3}, C_{B3}, C_{A3m}]$

دو متغیر خروجی: $y^T = [h_m, C_{A3m}]$

دو متغیر کنترل: $u^T = [m_2 \quad m_3]$

پنج متغیر اغتشاش: $d^T = [F_1, C_{A1}, C_{B1}, C_{A2}, C_{B2}]$

مثال شبیه سازی از مثال فوق با نام Example4_sc ارائه شده است.

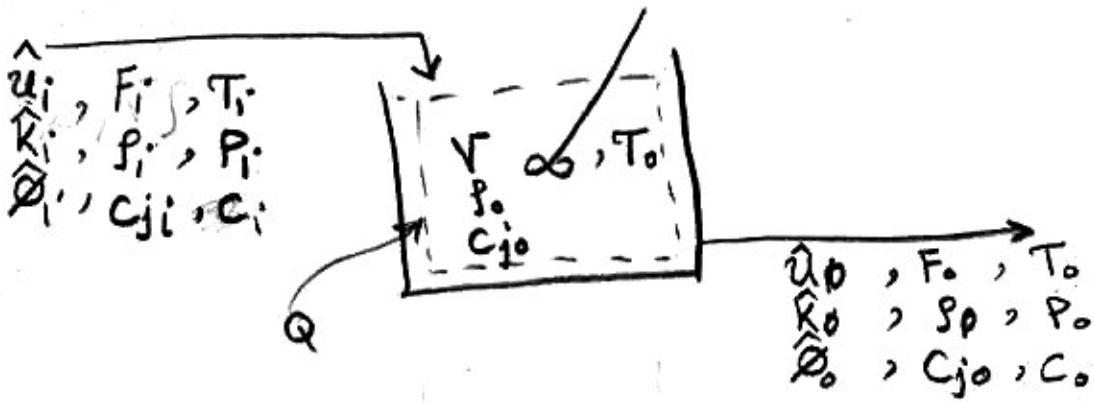
* * *

**موازنه انرژی:** در حالت کلی برای سیستم lumped موازنه انرژی بصورت زیر نوشته می‌شود:

$$\left(\begin{array}{c}\text{انرژی حمل شده از طریق}\\ \text{دیواره}\end{array}\right) + \left(\begin{array}{c}\text{انرژی خروجی در}\\ \text{انرژی حرکت سیال}\end{array} - \begin{array}{c}\text{انرژی ورودی در}\\ \text{انرژی حرکت سیال}\end{array}\right) = \begin{array}{c}\text{نرخ تغییرات انرژی}\\ \text{در حجم کنترل (ها)}\end{array}$$

$$- \left(\begin{array}{c}\text{انرژی تولید شده در اثر واکنش شیمیایی}\end{array}\right) + \begin{array}{c}\text{نرخ کار انجام شده توسط}\\ \text{حجم کنترل}\\ \text{(کار شفت)}\end{array}$$

$$- \left(\begin{array}{c}\text{نرخ}\\ \text{کار انجام شده توسط}\\ \text{حجم کنترل}\end{array}\right)$$




$$j = 1, \ldots, NC$$

$$\frac{d(C_o V)}{dt} = F_i C_i - F_o C_o + V \sum_{j=1}^{NC} R_j$$

★ موازنه جرم کل (مولی)

$$\frac{d(C_{jo} V)}{dt} = F_i C_{ji} - F_o C_{jo} + R_j V \quad , \quad j = 1, \dots, NC-1$$

موازنه جزء ؛ نرخ تولید جزء j ام

$$\frac{d\left[(\hat{u}_o + \hat{k}_o + \hat{\phi}_o) V \rho_o\right]}{dt} = F_i \rho_i (\hat{u}_i + \hat{k}_i + \hat{\phi}_i) - F_o \rho_o (\hat{u}_o + \hat{k}_o + \hat{\phi}_o) + Q + Q_r - W - (F_o P_o - F_i P_i)$$

انرژی پتانسیل واحد جرم — انرژی جنبشی واحد جرم — انرژی درونی واحد جرم

★ موازنه انرژی :

حال با فرضیات زیر موازنه انرژی را ساده کنید :

۱- استفاده از تعریف آنتالپی : $\hat{h} = \hat{u} + P/\rho$ ← آنتالپی واحد جرم

۲- تابع دو متغیر مستقل وجود دارد

۳- تغییرات انرژی پتانسیل حذف شود

۴- در تابع دو متغیر مستقل وجود دارد. در تابع دو متغیر مستقل تغییرات انرژی جنبشی حذف شود

بنابراین داریم :

$$\frac{d(\hat{u}_o V \rho_o)}{dt} = F_i \rho_i \hat{h}_i - F_o \rho_o \hat{h}_o + Q + Q_r - W$$

(J/kg) (J/kg) (kg/m³) (m³/s) (J/s) (J/s)

با استفاده از معادله فوق ← معادله آنتالپی و انرژی داخلی برحسب دما و ترکیب اجزا بدست می‌آید.

همانطور که اشاره گردید انرژی داخلی بصورت مطلق قابل محاسبه نمی‌باشد لذا مقدار آن براساس یک دمای مبنا ($T_r$) محاسبه می‌گردد. بعبارت دیگر مقدار تغییر در انرژی داخلی واحد جرم از دمای مبنا مورد نظر می‌باشد. بدین منظور در جداول از روابط زیر استفاده می‌شود :

- راه دقیق (کولازر و نیازمند معادلات حالت):

مایعات: $\tilde{h}_L = \tilde{h}_G^{ig} + (\tilde{h}_L - \tilde{h}_G^{ig})$ (SI: J/kmol)

از طریق معادلات حالت (Equation of states) قابل محاسبه و ارائه (در کتب Chemical Eng. Thermodynamics مراجعه شود)

گازها: $\tilde{h}_G = \tilde{h}_G^{ig} + (\tilde{h}_G - \tilde{h}_G^{ig})$

محاسبه آنتالپی گاز ایده‌آل:

$\tilde{h}_G^{ig} = \sum_{i=1}^{Nc} y_i \left( \int_{T_r}^{T} \tilde{C}_{P_i}^{ig} dT \right)$ ✓ ، $\tilde{C}_{P_i}^{ig}$ = ظرفیت حرارتی گاز ایده‌آل جزء i ام (فقط تابع دما) ، در حذف‌نویسک‌ها برای مواد مختلف وجود دارد.

- تعریف ظرفیت حرارتی:

$\tilde{C}_P = \left(\frac{d\tilde{h}}{dT}\right)_P$ ① : تغییرات آنتالپی نسبت به دما در فشار ثابت $\left(SI = \frac{J}{kmol.K}\right)$

$\tilde{C}_V = \left(\frac{d\tilde{u}}{dT}\right)_V$ ② : تغییرات انرژی داخلی نسبت به دما در حجم ثابت $\left(SI = \frac{J}{kmol.K}\right)$

- توجه: برای مایعات و جامدات معمولاً $\tilde{C}_P \simeq \tilde{C}_V$ فرض می‌شود.

- توجه ۲: برای گازهای ایده‌آل رابطه زیر مابین $\tilde{C}_P$ و $\tilde{C}_V$ وجود دارد:

$\hat{h} = \hat{u} + \frac{P}{\rho} \Rightarrow \tilde{h} = \tilde{u} + \frac{P}{c}$ ③ ، گاز ایده‌آل: $PV = nRT \rightarrow \frac{P}{c} = RT$ ④

SI: 8314 $\left(\frac{J}{kmol.K}\right)$ ثابت گازها

③,④ $\Rightarrow \tilde{h} = \tilde{u} + RT \Rightarrow d\tilde{h} = d\tilde{u} + R\,dT$ ⑤

①,②,⑤ $\Rightarrow \tilde{C}_P dT = \tilde{C}_V dT + R\,dT \Rightarrow \tilde{C}_P = \tilde{C}_V + R$ برای گازهای ایده‌آل

روش فوق برای محاسبه آنتالپی (انرژی داخلی) کمی وقت‌گیر بوده و نیازمند کامپیوتر و برنامه‌نویسی است و در محاسبات دستی متداول روش تقریبی زیر را دنبال نمود:

- روش تقریبی محاسبه آنتالپی (مخلوط مایع):

داده‌های آزمایشگاهی مخلوط

$$\begin{cases} \tilde{h}_L \approx \tilde{C}_{P_L}(T_L - T_r) + \Delta h_{mix} \\ \tilde{C}_{P_L} = \sum_{i=1}^{NC} x_i \tilde{C}_{P_{L_i}} \end{cases}$$

($\Delta h_{mix} = 0$ مخلوط مایع ایده‌آل)

- معادلات فوق برای اجزای نوشته شده‌اند که ظرفیت حرارتی صالحی تقریباً ثابت است.

$T_L =$ دمای مخلوط مایع

- روش تقریبی محاسبه آنتالپی (مخلوط گاز ایده‌آل):

$$\tilde{h}_G \approx \tilde{h}_G^{ig} = \sum_{i=1}^{NC} y_i \left( \int_{T_r}^{T_G} \tilde{C}_{P_i}^{ig} \, dT \right), \quad T_G = \text{دمای مخلوط گاز}$$

یا

$$\tilde{h}_G \approx \tilde{C}_{P_L}(T_G - T_r) + \tilde{\lambda}_G, \quad \tilde{\lambda}_G = \text{گرمای نهان تبخیر مخلوط مایع در دمای } T_G \left(\frac{J}{kmol}\right)$$

$$\tilde{\lambda}_G = \sum_{i=1}^{NC} y_i \tilde{\lambda}_{G_i}.$$

- نحوه محاسبه نرخ تبادل حرارتی سیال داخل حجم کنترل با دیواره ($\dot{Q}$):

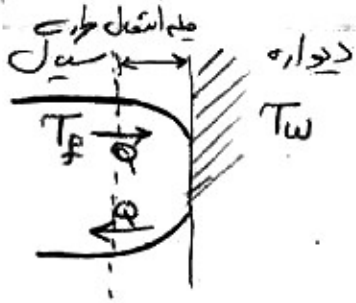
همانگونه که در ابتدا دیدیم، سه روش انتقال حرارت وجود دارد که عبارتند از:

(Conduction heat transfer)
۱- انتقال حرارت از طریق هدایت (معمولاً در جامدات از این فرم استفاده می‌گردد)

۲- انتقال حرارت از طریق جابجایی (معمولاً در سیالات در تماس با سطوح جامد از این فرم انتقال حرارت استفاده می‌گردد؛ Convection heat transfer)

۳- انتقال حرارت از طریق تابش (در صورتی که سطوح حین دما وجود دارد از این فرم انتقال حرارت استفاده می‌گردد). Rediation heat transfer

- برای محاسبه میزان انتقال حرارت از سیال به دیواره و یا بالعکس عموماً از فرم انتقال حرارت جابجایی زیر استفاده می‌گردد (Newton's cooling law):




معمولاً فرض می‌شود که در فیلمی از سیال نزدیک دیواره گرادیان دما وجود داشته و خارج از آن فیلم دما ثابت است به فیلم

مذکور، فیلم انتقال حرارت گفته می‌شود. هرچه سرعت حرکت سیال زیادتر باشد،
ضخامت فیلم انتقال حرارت کمتر خواهد بود. بنابراین راحتر می‌توان حساب انتقال حرارت

مابین سیال و دیواره پیدا نمود:

$$Q = h S (T_w - T_f) = \frac{T_w - T_f}{1/hS}$$

($T_w$: دمای دیواره، $T_f$: دمای سیال، اختلاف دما، مقاومت حرارتی)

نرخ حرارت ورودی به سیال ($SI: \frac{J}{s}$)

$h$ = heat transfer coefficient ($SI: \frac{J}{s \times m^2 \times K}$) ضریب انتقال حرارت سیال و دیواره

$S$ = heat transfer area ($SI: m^2$) سطح انتقال حرارت سیال و دیواره

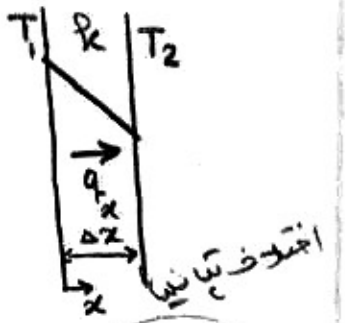
ضریب انتقال حرارت تابع، سرعت حرکت سیال، شکل هندسی دیواره و خواص ترموفیزیکی سیال می‌باشد (ویسکوزیته، دانسیته، ضریب هدایت حرارتی، ظرفیت حرارتی). در مورد نحوه محاسبه $h$ بعداً به تفصیل بحث خواهد شد.

— نحوه محاسبه انتقال حرارت در دیواره (جامدات): برای محاسبه انتقال حرارت در جامدات از قانون هدایت فوریه بصورت زیر استفاده می‌شود:

$$q_x \propto \frac{-dT}{dx} \Rightarrow q_x = -k \frac{dT}{dx}$$

($q_x$: شکل انتقال حرارت، $SI: \frac{J/s}{m^2}$)

$k$: ضریب هدایت حرارتی، Thermal conductivity ($SI = \frac{W}{m.K}$)




$$q_x \int_0^{\Delta x} dx = -k \int_{T_1}^{T_2} dT \Rightarrow q_x = \frac{T_1 - T_2}{\frac{\Delta x}{k}} \perp Q_x = \frac{T_1 - T_2}{\frac{\Delta x}{kS}}$$

($Q_x$: جریان حرارت (W)، $\frac{\Delta x}{kS}$: مقاومت هدایتی)

($S$: سطح انتقال حرارت (سطح عمود بر جهت انتقال حرارت))