

https://mnlotfollahi.profile.semnan.ac.ir/#about_me

mnlotfollahi@yahoo.com

Octave Levenspiel, Chemical Reaction Engineering, Third Edition, 1999.

Home works:

Chapter 5: Ideal Reactors for a Single Reaction

Chapter 5: , 4, 5, 6, 8, 9, 10,11,12, 13, 14,15,16, 20, 24, **Due to**

طراحی راکتورهای ایده ال برای واکنش های منفرد

-طبقه بندی راکتورها

در حالت کلی راکتورهایی که برای واکنش های متجانس استفاده می شود از سه

دسته **جاری پایا و جاری ناپایا یا نیمه پیوسته و راکتور Batch (ناپایا) و**

Semi-Batch تشکیل شده اند .

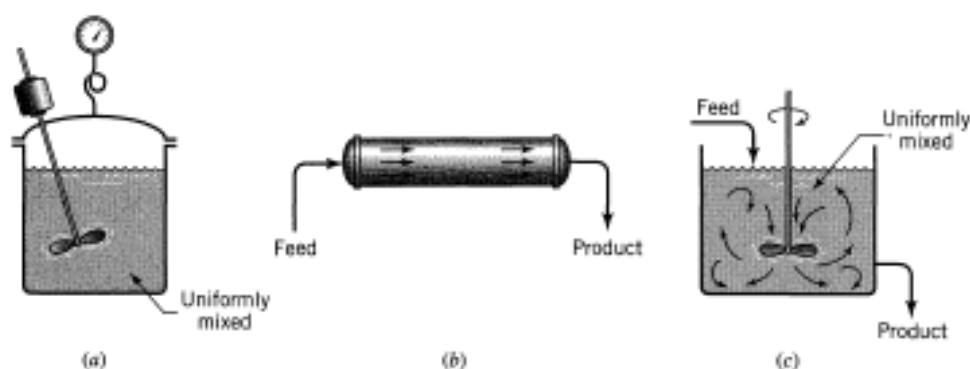
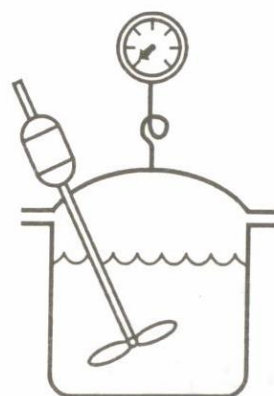


Figure 5.1 The three types of ideal reactors: (a) batch reactor, or BR; (b) plug flow reactor, or PFR; and (c) mixed flow reactor, or MFR.

دانشگاه سمنان-دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز- دکتر لطف اللهی - سینتیک و

طرح راکتور - طراحی راکتورها

در راکتورهای ناپیوسته **Batch** ابتدا ترکیب شونده ها در ظرفی قرار داده می شوند و به خوبی مخلوط می گردند و اجازه می دهند واکنش در مدت معینی صورت گیرد و سپس مخلوط حاصل از واکنش را از ظرف خارج می کنند در این راکتورها غلظت مواد ، تنها تابع زمان است و تابعیت مکانی ندارد یعنی در هر لحظه ترکیب نسبی در کل راکتور یکنواخت است .



شکل ۳-۱- راکتور ناپیوسته

راکتورهای لوله ای (plug) نوعی از راکتورهای جاری پایا هستند که در صنایع شیمیایی برای فرایندهای با مقیاس نیمه صنعتی و صنعتی استفاده می شوند.

در این راکتور ها غلظت با زمان تغییر نمی کند و همچنین در جهت شعاعی تغییر غلظت نداریم و تغییرات غلظت فقط در جهت محوری است (z-direction).



شکل ۳-۲- راکتور لوله‌ای

معایب

کنترل دما و غلظت در راکتور مشکل است .

مزایا

- ۱- دارای بالاترین میزان تبدیل در حجم راکتور ثابت برای درجه واکنش بزرگتر از یک است.
- ۲- نگهداری و تعمیر این راکتور نسبتاً راحت است .

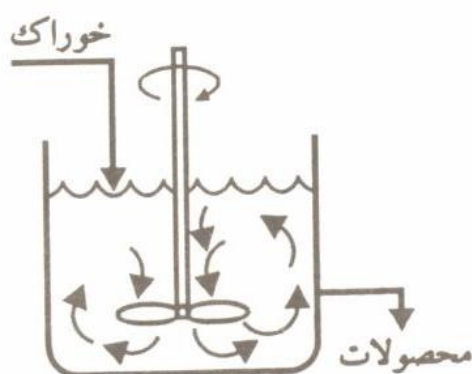
نوع دیگری از راکتورهای جاری راکتورهای مخلوط شونده mixed است که با نام های مختلف راکتور مخزنی همزن دار آرمانی $CFSTR, CSTR, C$ راکتور مخزنی همزن دار جریان ثابت) معروف است . در این راکتورها سرعت پایین است و معمولاً در مواردی که سرعت بالا مد نظر نیست به کار می رود (مثلاً واکنش های گرمازا و

انفجاری (). در این راکتورها سرعت در نقاط مختلف راکتور ثابت است و غلظت در

خروجی راکتور با غلظت در داخل آن یکسان است . در راکتورهای مخلوط شونده

غلظت تابعیت زمانی و مکانی ندارد هر گاه اختلاط شدید لازم باشد از این راکتور

استفاده می شود .



شکل ۳-۳- راکتور مخلوط شونده

معایب

برای درجه واکنش بزرگتر از یک دارای کمترین میزان تبدیل است

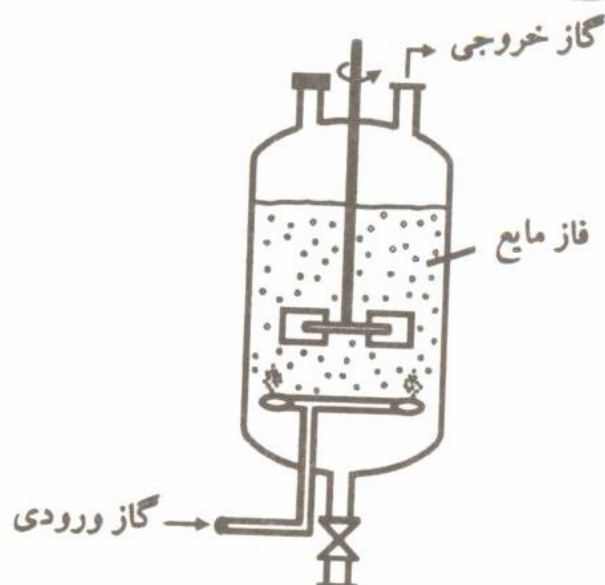
مزایا: کنترل دما با سهولت نسبی بالاتری صورت می گیرد .

نکته : اکثر راکتورهای جریان فاز مایع همگن، CSTR و اکثر راکتورهای جریان فاز

گاز راکتور لوله ای هستند .

راکتورهای نیمه پیوسته semi batch که یک نمونه از آنها در شکل زیر نشان داده

شده است بیشتر در واکنش های تعادلی مورد استفاده قرار می گیرند .



مزایا

۱- کنترل دما ساده تر است.

۲- واکنش های جانبی را با پایین نگه داشتن غلظت یکی از واکنش دهنده ها می

توان به حداقل رساند

۳- در برخی از واکنش های دو فازی می توان از این نوع راکتور استفاده کرد.

3-2 راکتور ناپیوسته

$$\begin{aligned} \text{input} &= \text{output} + \text{disappearance} + \text{accumulation} \\ \text{or} \quad & + \left(\begin{array}{c} \text{rate of loss of reactant A} \\ \text{within reactor due to} \\ \text{chemical reaction} \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} \text{rate of accumulation} \\ \text{of reactant A} \\ \text{within the reactor} \end{array} \right) \quad (1) \end{aligned}$$

Evaluating the terms of Eq. 1, we find

$$\begin{aligned} \text{disappearance of A} &= (-r_A)V = \left(\frac{\text{moles A reacting}}{(\text{time})(\text{volume of fluid})} \right) (\text{volume of fluid}) \\ \text{by reaction,} & \\ \text{moles/time} & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{accumulation of A,} &= \frac{dN_A}{dt} = \frac{d[N_{A0}(1 - X_A)]}{dt} = -N_{A0} \frac{dX_A}{dt} \\ \text{moles/time} & \end{aligned}$$

معادله عملکرد راکتور ناپیوسته به صورت زیر است :

$$t = N_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx}{-r_A V} \quad (1-3)$$

معادله فوق زمان لازم را برای رسیدن به درجه تبدیل x_A در حالت کلی نشان

می دهد و برای هر دو حالت هم دما و غیر هم صادق است .

معادله فوق در حالتی که جرم ویژه سیال ثابت باشد به صورت زیر بیان می شود :

$$t = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A} = - \int_{C_A}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{-r_A} \quad (2-3)$$

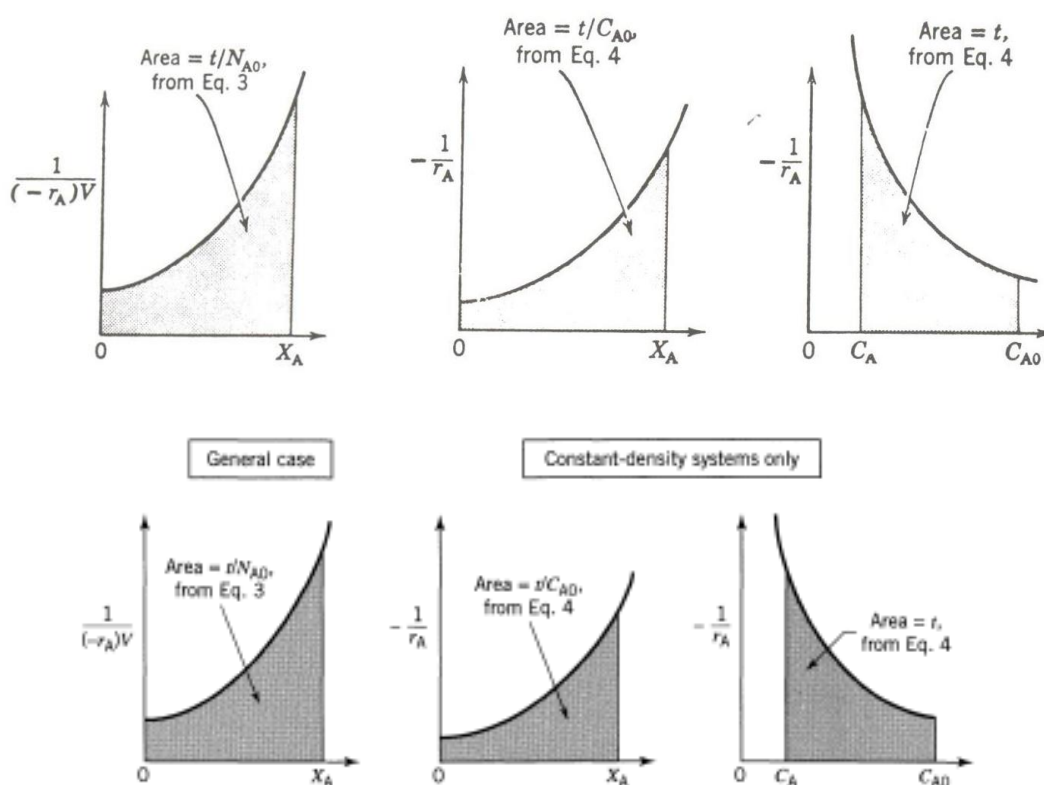


Figure 5.2 Graphical representation of the performance equations for batch reactors, isothermal or nonisothermal.

هر گاه حجم متغیر باشد باید از معادله زیر استفاده کنیم :

$$t = C_{A_0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)(1 + \varepsilon_A x_A)} \quad (3-3)$$

۳-۳- زمان پر شدن و سرعت پر شدن - زمان اقامت متوسط

قبل از اینکه سراغ بررسی راکتورهای پیوسته برویم با چند تعریف آشنا می شویم .

زمان پر شدن (τ) عبارت است از زمان لازم برای پر شدن راکتور از مواد اولیه در

حالتی واکنش شیمیایی نداریم..

$$\tau = \frac{V}{\nu_0} = \frac{C_{A_0} V}{F_{A_0}} \quad (4-3)$$

V : حجم راکتور، ν_0 : دبی حجمی خوراک ورودی F_{A_0} : دبی مولی A ورودی

سرعت پر شدن (s): چند برابر حجم راکتور از خوراک که در واحد زمان در راکتور پر

می شود

$$s = \frac{1}{\tau} = \frac{\nu_0}{V} \quad (5-3)$$

زمان اقامت متوسط ($\bar{t}$) عبارت است از زمان اقامت متوسط مواد جاری در درون

راکتور و به صورت زیر تعریف می شود:

$$\bar{t} = \frac{V}{\nu_f} \quad (6-3)$$

در حالت کلی برای ν_f در حالت گاز ایده آل داریم:

$$\nu = \nu_0 (1 + \varepsilon_A x_A) \frac{P_0}{P} \frac{T}{T_0}$$

اگر شرایط دما و فشار ثابت باشد می توان نوشت :

$$v = v_0(1 + \varepsilon_A x_A)$$

و در نتیجه :

$$\bar{t} = \frac{V}{v_f} = \frac{V}{v_0(1 + \varepsilon_A x_A)} = \frac{\tau}{1 + \varepsilon_A x_A}$$

با توجه به معادله فوق در واکنش هایی که $\varepsilon_A = 0$ است $\bar{t} = \tau$

مثال) واکنش فاز گاز $A \rightarrow 2R$ در یک راکتور mixed به حجم 600 cm^3 انجام می شود . شدت جریان خوراک که متشکل از ۵۰٪ A و ۵۰٪ گاز خنثی است $100 \text{ cm}^3 / \text{min}$ می باشد میانگین زمان اقامت (mean residence time) در راکتور ۵ دقیقه است . میزان تبدیل A در راکتور چیست ؟

حل:

$$\varepsilon_A = \left(\frac{1.5 - 1}{1} \right) = 0.5$$

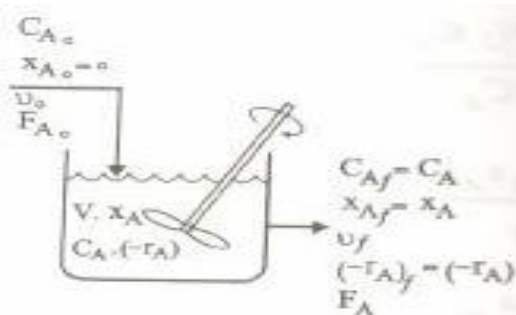
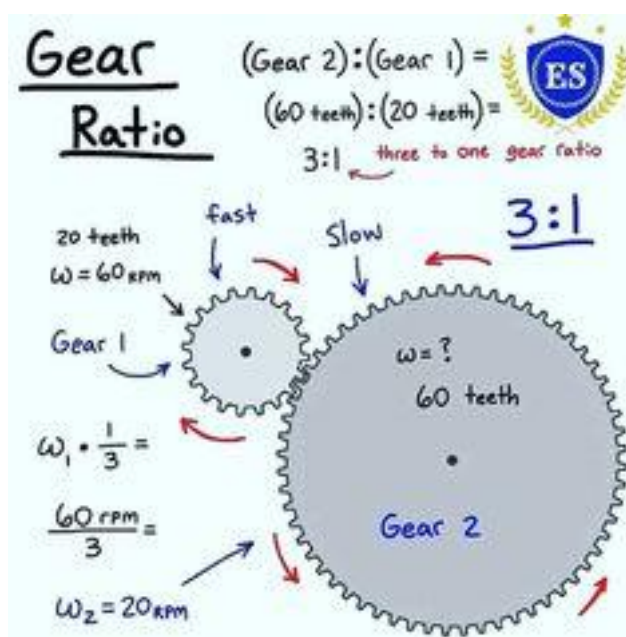
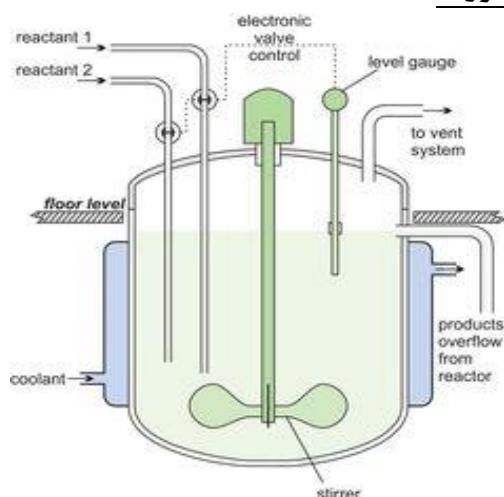
$$\bar{t} = \frac{V}{v_f} = \frac{V}{v_0(1 + \varepsilon_A x_A)} \Rightarrow 5 = \frac{600}{100(1 + 0.5x_A)} \Rightarrow x_A = 0.4$$

۴-۳- راکتور مخلوط شونده

(Steady-State Mixed Flow Reactor: MFR)

(Constant Flow Stirred Tank Reactor: CSTR)

یک راکتور مخلوط شونده به شکل زیر را در نظر می گیریم :



شکل ۳-۶ راکتور مخلوط شونده با نمادهای مورد استفاده در معادلات

$$\text{input} = \text{output} + \text{disappearance by reaction} + \text{accumulation} \quad (10)$$

As shown in Fig. 5.3, if $F_{A0} = v_0 C_{A0}$ is the molar feed rate of component A to the reactor, then considering the reactor as a whole we have

$$\text{input of A, moles/time} = F_{A0}(1 - X_{A0}) = F_{A0}$$

$$\text{output of A, moles/time} = F_A = F_{A0}(1 - X_A)$$

$$\begin{aligned} \text{disappearance of A} \\ \text{by reaction,} \\ \text{moles/time} \end{aligned} = (-r_A)V = \left(\frac{\text{moles A reacting}}{(\text{time})(\text{volume of fluid})} \right) \left(\text{volume of reactor} \right)$$

Introducing these three terms into Eq. 10, we obtain

$$F_{A0}X_A = (-r_A)V$$

which on rearrangement becomes

$$\begin{aligned} \text{or} \quad \frac{V}{F_{A0}} &= \frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{\Delta X_A}{-r_A} = \frac{X_A}{-r_A} \quad \text{any } \varepsilon_A \quad (11) \\ \tau &= \frac{1}{s} = \frac{V}{v_0} = \frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = \frac{C_{A0}X_A}{-r_A} \end{aligned}$$

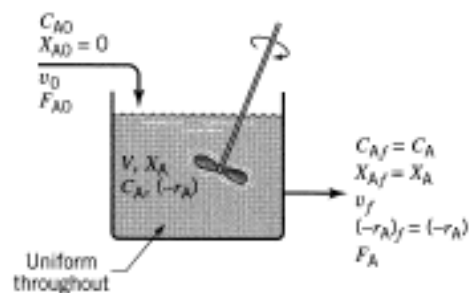


Figure 5.3 Notation for a mixed reactor.

معادله عملکرد راکتور مخلوط شونده به صورت زیر است:

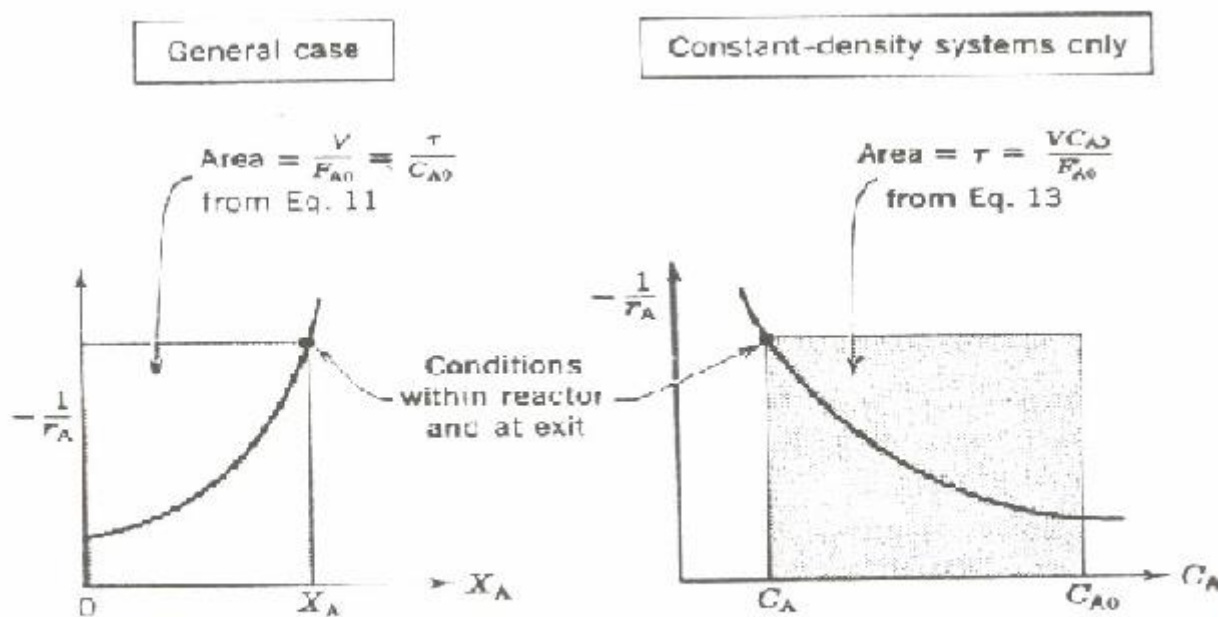
$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\Delta x_A}{(-r_A)_f} = \frac{x_{Af} - x_{A0}}{(-r_A)_F} \quad (7-3)$$

$$\tau_m = \frac{C_{A_0}(x_{A_f} - x_{A_0})}{(-r_A)_f} \quad (8-3)$$

معادلات فوق در حالتی که جرم ویژه ثابت باشد به صورت زیر بیان می شوند :

$$\frac{V}{F_{A_0}} = \frac{C_{A_0} - C_A}{C_{A_0}(-r_A)} \quad (9-3)$$

$$\tau_m = \frac{C_{A_0} - C_A}{-r_A} \quad (10-3)$$



شکل ۴ - نمایش ترسیمی معادلات طرح راکتور مخلوط گننده

حالت‌های خاص

برای واکنش‌های درجه اول داریم :

$$\varepsilon = 0 : k\tau_m = \frac{x_A}{1 - x_A} = \frac{C_{A_0} - C_A}{C_A} \quad \frac{C_A}{C_{A_0}} = \frac{1}{1 + k\tau_m} \quad (11-3)$$

$$\varepsilon \neq 0 : k\tau_m = \frac{x_A(1 + \varepsilon_A x_A)}{1 - x_A} \quad (12-3)$$

مثال: در انجام واکنش گازی ساده $A \rightarrow 2R$ از یک راکتور مخزنی همزن دار پیوسته استفاده می شود. اگر برای حصول تبدیل ۵۰ درصد زمان ماند لازم یک ساعت باشد ثابت سرعت واکنش برابر خواهد بود با :

(حل)

$$\varepsilon_A = \frac{2-1}{1} = 1$$

با استفاده از رابطه (۱۲-۳) داریم :

$$k\tau_m = \frac{x_A(1 + \varepsilon_A x_A)}{1 - x_A} \Rightarrow k \times 1 = \frac{0.5(1 + 1 \times 0.5)}{1 - 0.5} \Rightarrow k = 1.5h$$

برای واکنش های درجه دوم به شکل محصولات $2A \rightarrow$ با معادله سرعت $-r = kC_A^2$ در حجم ثابت داریم

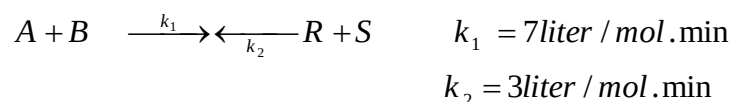
$$k\tau_m = \frac{C_{A_0} - C_A}{C_A^2} \quad (13-3)$$

یا

$$kC_{A_0} \tau m = \frac{x_A}{(1 - x_A)^2} \quad (14-3)$$

مثال ۳- عملکرد راکتور Mixed

واکنش زیر را در فازمایع در یک راکتور mixed به حجم ۱۲۰ لیتر بصورت مداوم انجام دهند .



دو جریان خوراک را که اولی محتوی 2.8 mol / liter از A و دیگری 1.6 mol / liter از B است به حجم های مساوی وارد راکتور مینمایند . درجه تبدیل ۷۵٪ از جسم محدود کننده است (نگاه کنید به شکل E3) شدت جریان هر یک از دو خوراک را معین نمائید جرم ویژه را ثابت فرض می کنیم

حل :

غلظت سازندگان در مخلوط دو خوراک عبارتست از

$$C_{A0} = 1.4 \text{ mol / liter}$$

$$C_{B0} = 0.8 \text{ mol / liter}$$

$$C_{R0} = C_{S0} = 0$$

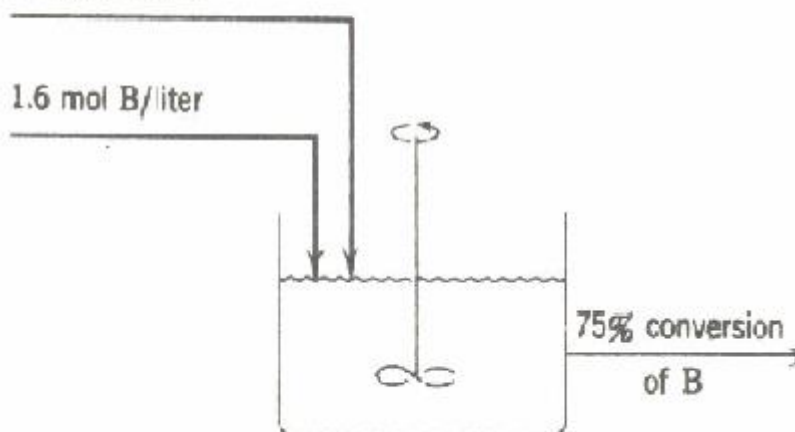
$$C_{A0} = 1.4 \text{ mol / liter}$$

$$C_{B0} = 0.8 \text{ mol / liter}$$

$$C_{R0} = C_{S0} = 0$$

$$2.8 \text{ mol A / liter}$$

$$1.6 \text{ mol B / liter}$$



E3

درحالتی که درجه تبدیل $\varepsilon = 0,75\%B$ است غلظت اجسام در داخل راکتور و جریان

خروجی از آن عبارتند از :

$$c_A = 1.4 - 0.6 = 0.8 \text{ mol/liter}$$

$$c_B = 0.8 - 0.6 = 0.2 \text{ mol/liter}$$

$$c_R = 0.6 \text{ mol/liter}$$

$$c_s = 0.6 \text{ mol/liter}$$

سرعت واکنش در شرایط موجود در داخل راکتور عبارتست از :

$$\begin{aligned} -r_A &= -r_B = k_1 c_A c_B - k_2 c_R c_S \\ &= \left(7 \frac{\text{liter}}{\text{mol} \cdot \text{min}} \right) \left(0.8 \frac{\text{mol}}{\text{liter}} \right) \left(0.2 \frac{\text{mol}}{\text{liter}} \right) - \left(3 \frac{\text{liter}}{\text{mol} \cdot \text{min}} \right) \left(0.6 \frac{\text{mol}}{\text{liter}} \right)^2 \\ &= (1.12 - 1.08) \frac{\text{mol}}{\text{liter} \cdot \text{min}} = 0.04 \frac{\text{mol}}{\text{liter} \cdot \text{min}} \end{aligned}$$

درحالتی که جرم ویژه ثابت و بنابراین $\varepsilon = 0$ است معادله بشکل زیر نوشته خواهد

شد

$$\tau = \frac{V}{v} = \frac{c_{A0} - c_A}{-r_A} = \frac{C_{B0} - C_B}{-r_B}$$

در نتیجه شدت جریان حجمی بداخل و خارج از راکتور عبارتست از :

$$\begin{aligned} v &= \frac{V(-r_A)}{c_{A0} - c_A} = \frac{V(-r_B)}{C_{B0} - C_B} \\ &= \frac{(120 \text{ liter})(0.04 \text{ mol/liter} \cdot \text{min})}{0.6 \text{ mol/liter}} = 8 \frac{\text{liter}}{\text{min}} \end{aligned}$$

و یا شدت جریان حجمی هر یک از دو خوراک A,B برابر 4 liter/min میباشد .

EXAMPLE 5.2 KINETICS FROM A MIXED FLOW REACTOR

Pure gaseous reactant A ($C_{A0} = 100$ millimol/liter) is fed at a steady rate into a mixed flow reactor ($V = 0.1$ liter) where it dimerizes ($2A \rightarrow R$). For different gas feed rates the following data are obtained:

Run number	1	2	3	4
v_0 , liter/hr	10.0	3.0	1.2	0.5
C_A , millimol/liter	85.7	66.7	50	33.4

Find a rate equation for this reaction.

SOLUTION

For this stoichiometry, $2A \rightarrow R$, the expansion factor is

$$\varepsilon_A = \frac{1 - 2}{2} = -\frac{1}{2}$$

and the corresponding relation between concentration and conversion is

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1 - X_A}{1 + \varepsilon_A X_A} = \frac{1 - X_A}{1 - \frac{1}{2} X_A}$$

or

$$X_A = \frac{1 - C_A/C_{A0}}{1 + \varepsilon_A C_A/C_{A0}} = \frac{1 - C_A/C_{A0}}{1 - C_A/2C_{A0}}$$

The conversion for each run is then calculated and tabulated in column 4 of Table E5.2.

Table E5.2

Run	Given		Calculated			
	v_0	C_A	X_A	$(-r_A) = \frac{v_0 C_{A0} X_A}{V}$	$\log C_A$	$\log (-r_A)$
1	10.0	85.7	0.25	$\frac{(10)(100)(0.25)}{0.1} = 2500$	1.933	3.398
2	3.0	66.7	0.50	1500	1.824	3.176
3	1.2	50	0.667	800	1.699	2.903
4	0.5	33.3	0.80	400	1.522	2.602

From the performance equation, Eq. 11, the rate of reaction for each run is given by

$$(-r_A) = \frac{v_0 C_{A0} X_A}{V}, \quad \left[\frac{\text{millimol}}{\text{liter} \cdot \text{hr}} \right]$$

These values are tabulated in column 5 of Table E5.2.

Having paired values of r_A and C_A (see Table E5.2) we are ready to test various kinetic expressions. Instead of separately testing for first-order (plot r_A vs. C_A), second-order (plot r_A vs. C_A^2), etc., let us test directly for n th-order kinetics. For this take logarithms of $-r_A = kC_A^n$, giving

$$\log(-r_A) = \log k + n \log C_A$$

For n th-order kinetics this data should give a straight line on a $\log(-r_A)$ vs. $\log C_A$ plot. From columns 6 and 7 of Table E5.2 and as shown in Fig. E5.2, the

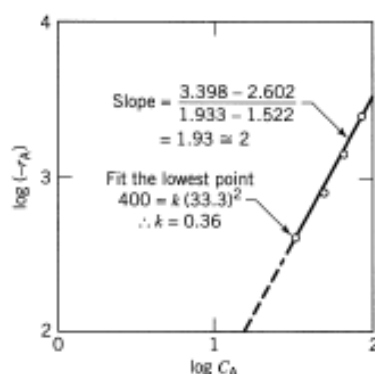


Figure E5.2

four data points are reasonably represented by a straight line of slope 2, so the rate equation for this dimerization is

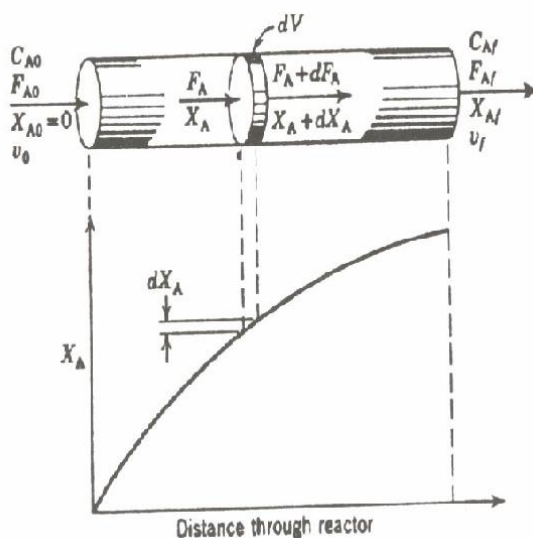
$$-r_A = \left(0.36 \frac{\text{liter}}{\text{hr} \cdot \text{millimol}} \right) C_A^2, \quad \left[\frac{\text{millimol}}{\text{liter} \cdot \text{hr}} \right]$$

Comment. If we ignore the density change in our analysis (or put $\epsilon_A = 0$ and use $C_A/C_{A0} = 1 - X_A$) we end up with an incorrect rate equation (reaction order $n \approx 1.6$) which when used in design would give wrong performance predictions.

۵-۳- راکتور لوله ای:



یک راکتور لوله ای به شکل زیر را در نظر می گیریم :



$$\text{input} = \text{output} + \text{disappearance by reaction} + \text{accumulation} \quad (10)$$

Referring to Fig. 5.5, we see for volume dV that

input of A, moles/time = F_A

output of A, moles/time = $F_A + dF_A$

disappearance of A by

reaction, moles/time = $(-r_A)dV$

$$= \left(\frac{\text{moles A reacting}}{(\text{time})(\text{volume of fluid})} \right) \left(\frac{\text{volume of}}{\text{element}} \right)$$

Introducing these three terms in Eq. 10, we obtain

$$F_A = (F_A + dF_A) + (-r_A)dV$$

Noting that

$$dF_A = d[F_{A0}(1 - X_A)] = -F_{A0}dX_A$$

We obtain on replacement

$$F_{A0}dX_A = (-r_A)dV \quad (16)$$

معادله عملکرد راکتور لوله ای به صورت زیر است :

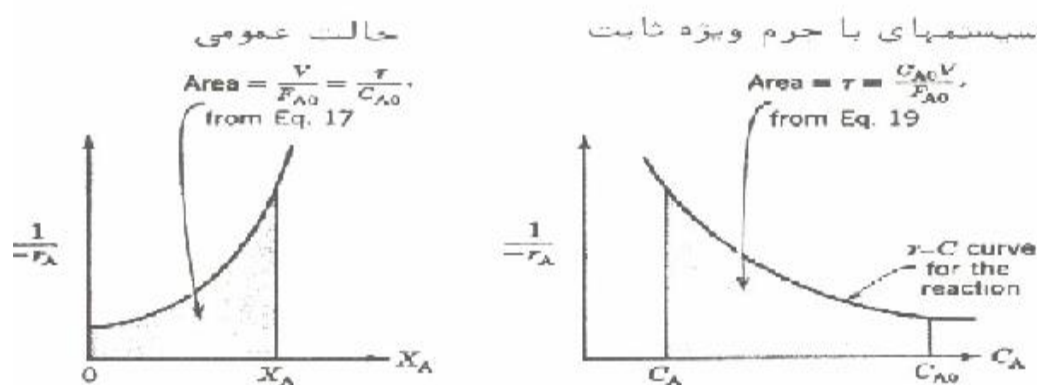
$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_{x_{A0}}^{x_{Af}} \frac{dx_A}{-r_A} \quad (15-3)$$

$$\tau_p = C_{A0} \int_{x_{A0}}^{x_{Af}} \frac{dx_A}{-r_A} \quad (16-3)$$

معادلات فوق در حالتی که جرم ویژه ثابت باشد به صورت زیر بیان می شوند

$$\frac{V}{F_{A0}} = -\frac{1}{C_{A0}} \int_{c_{A0}}^{c_A} \frac{dC_A}{-r_A} \quad (17-3)$$

$$\tau_p = -\int_{c_{A0}}^{c_A} \frac{dC_A}{-r_A} \quad (18-3)$$



شکل ۶ - نمایش ترسیمی معادلات عملکرد راکتور

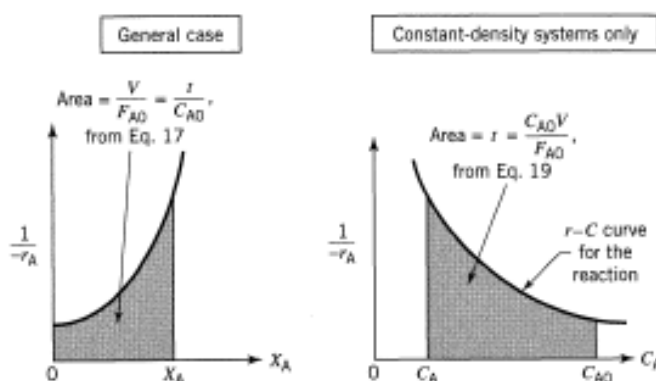


Figure 5.6 Graphical representation of the performance equations for plug flow reactors.

حالت‌های خاص

برای واکنش درجه صفر با ε_A ثابت از رابطه زیر استفاده می شود .

Zero-order homogeneous reaction, any constant

$$k\tau_p = C_{A0} x_A$$

برای واکنش درجه اول از روابط زیر استفاده می شود :

First-order irreversible reaction, A + products, any constant,

$$\varepsilon = 0 : k\tau_p = \ln(1 - x_A) \quad (20-3)$$

$$\varepsilon \neq 0 : k\tau_p = -(1 + \varepsilon_A) \ln(1 - x_A) - \varepsilon_A x_A \quad (21-3)$$

مثال) واکنش همگن در فاز گاز $A \rightarrow 3R$ در دمای $215^\circ C$ انجام می گیرد. اگر

سرعت واکنش $-r_A = C_A$ باشد و خوراک ورودی به راکتور لوله ای پیوسته شامل ۵۰

درصد A و ۵۰ درصد گاز خنثی باشد زمان ظاهری لازم برای تبدیل ۸۰ درصد برابر

خواهد بود با:

(حل)

با استفاده از رابطه (۳-۲۱) داریم :

$$k \tau_p = -(1 + \varepsilon_A) \ln(1 - x_A) - \varepsilon_A x_A$$

$$\varepsilon_A = \frac{4 - 2}{2} = 1$$

$$1 \times \tau_p = -(1 + 1) \cdot \ln(1 - 0.8) - 1 \times 0.8 \Rightarrow \tau_p = -2 \ln 0.2 - 0.8$$

برای واکنش درجه دوم برگشت ناپذیر به صورت محصولات $A + B \rightarrow$ باشدت جریان

های برابر از A و B برای واکنش های به صورت محصولات $2A \rightarrow$ داریم :

$$\varepsilon = 0 : C_{A0} k \tau_p = \frac{x_A}{1 - x_A}$$

Second-order irreversible reaction, $A + B = \text{products}$ with equimolar feed or $2A = \text{products}$, any constant E_{a} ,

$$\varepsilon \neq 0 : C_{A0} k \tau_p = 2\varepsilon_A(1 + \varepsilon_A) \ln(1 - x_A) + \varepsilon_A^2 x_A + (\varepsilon_A + 1)^2 \frac{x_A}{1 - x_A} \quad (23-3)$$

مثال ۴ - عملکرد راکتور plug

یک واکنش متجانس گازی $A \rightarrow 3R$ در $215^\circ C$ دارای معادله سرعتی بشکل زیر می^۰باشد :

$$-r_A = 10^{-2} C_A^{1/2} \quad [\text{mol/liter} \cdot \text{sec}]$$

زمان پرشدن گنجایش لازم را برای حصول ۵۰٪ تبدیل در مورد خوراکی متشکل از ۵۰٪ اجسام بی اثر که وارد یک راکتور plug در دمای $215^\circ C$ و فشار ۵ اتمسفر میشود بدست آورید .

$$(C_{A0} = 0.0625 \text{ mol/liter})$$

EXAMPLE 5.4 PLUG FLOW REACTOR PERFORMANCE

A homogeneous gas reaction $A \rightarrow 3R$ has a reported rate at $215^\circ C$

$$-r_A = 10^{-2} C_A^{1/2}, \quad [\text{mol/liter} \cdot \text{sec}]$$

Find the space-time needed for 80% conversion of a 50% A-50% inert feed to a plug flow reactor operating at $215^\circ C$ and 5 atm ($C_{A0} = 0.0625 \text{ mol/liter}$).

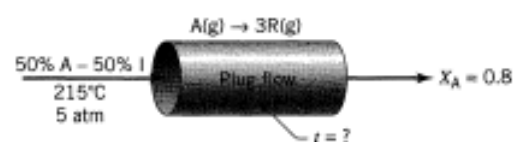


Figure E5.4a

حل

با توجه به این معادله شیمیایی و حضور ۵۰٪ جسم بی اثر دو حجم از خوراک گازی چهار حجم محصول کاملاً تبدیل شده بدست خواهد داد یعنی :

$$\varepsilon_A = \frac{4-2}{2} = 1$$

در این حالت معادله عملکرد راکتور plug یعنی رابطه ۱۷ خواهد شد:

$$\tau = c_{A0} \int_0^{x_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} = c_{A0} \int_0^{x_{Af}} \frac{dX_A}{k c_{A0}^{1/2} \left(\frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A} \right)^{1/2}} = \frac{C_{A0}^{1/2}}{k} \int_0^{0.8} \left(\frac{1+X_A}{1-X_A} \right)^{1/2} dX_A$$

این انتگرال را به سه نحو ممکنست محاسبه کرد: بطریق ترسیمی تحلیل عددی و یا جبری. این روش ها را ذیلا مورد بحث قرار میدهیم.

انتگرال گیری بطریق ترسیمی - ابتدا مقدار تابع زیر انتگرال را در نقاط معینی بدست آورده و (جدول E4) و انرا رسم مینماییم (شکل E4) با شمارش تعداد مربعات و یا تخمین نظری خواهیم داشت:

$$Area = \int_0^{0.8} \left(\frac{1+X_A}{1-X_A} \right)^{1/2} dX = (1.70)(0.8) = 1.36$$

Table E5.4

X_A	$\frac{1+X_A}{1-X_A}$	$\left(\frac{1+X_A}{1-X_A} \right)^{1/2}$
0	1	1
0.2	$\frac{1.2}{0.8} = 1.5$	1.227
0.4	2.3	1.528
0.6	4	2
0.8	9	3

Graphical Integration. First evaluate the function to be integrated at selected values (see Table E5.4) and plot this function (see Fig. E5.4b).

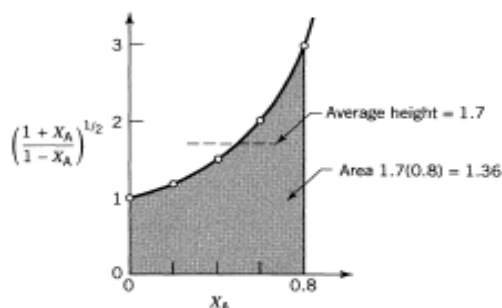


Figure E5.4b

Counting squares or estimating by eye we find

$$Area = \int_0^{0.8} \left(\frac{1+X_A}{1-X_A} \right)^{1/2} dX_A = (1.70)(0.8) = \underline{\underline{1.36}}$$

انتگرال گیری بطریق تحلیل عددی - با بکار بردن روش Simpsons که در

مورد تعداد زوجی از فواصل یکنواخت روی محور X_A قابل استفاده است و با توجه به

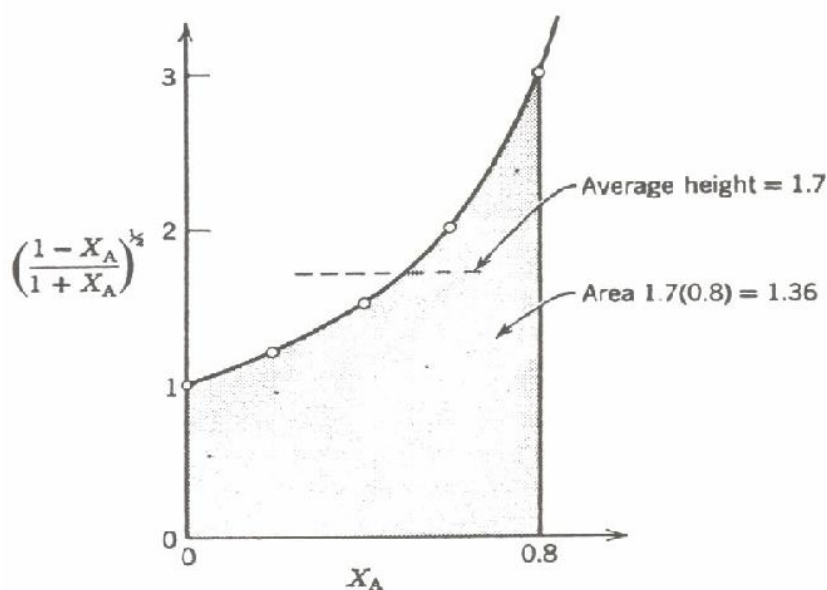
اعداد جدول E4 خواهیم داشت

$$\int_0^{0.8} \left(\frac{1+X_A}{1-X_A} \right)^{1/2} dX_A = (\text{عرض کل}) (\text{ارتفاع متوسط}) =$$

$$= \left[\frac{1(1)0 + 4(1.227) + 2(1.528) + 4(2)0 + 1(3)}{12} \right] (0.8) = 1.331$$

انتگرال گیری جبری - با استفاده از جدول انتگرال توابع

$$\int_0^{0.8} \left(\frac{1+X_A}{1-X_A} \right)^{1/2} dX_A = \int_0^{0.8} \frac{1+X_A}{\sqrt{1-X_A^2}} dX_A = (\text{arc sin } X_A - \sqrt{1-X_A^2}) \Big|_0^{0.8} = 1.328$$



E4.

دانشگاه سمنان-دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز- دکتر لطف اللهی - سینتیک و

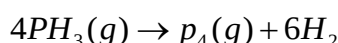
طرح راکتور - طراحی راکتورها

ترجیح یکی از روشها بر دیگر روشها منوط به شرایط موجود می باشد. در این مسئله خاص روش تحلیلی عددی سریع ترین و ساده ترین آنها بوده و در بیشتر موارد نیز جوابهای قابل قبولی بدست می دهد. پس از محاسبه انتگرال معادله (I) خواهد شد:

$$= \frac{(0.0625 \text{ mol / liter})^{1/2}}{(10^{-2} \text{ mol}^{1/2} / \text{liter}^{1/2} \cdot \text{sec})} (1.33) = 33.2 \text{ sec}$$

مثال ۵ حجم راکتور plug

تجزیه فسفین به شکل متجانس در فاز گازی



و در $1200^\circ F$ برطبق یک واکنش درجه اول صورت می گیرد:

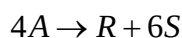
$$-r_{PH_3} = (10/\text{hr})c_{PH_3}$$

حجم یک راکتور plug را که بتواند در $1200^\circ F$ و 4.6 اتمسفر یک خوراک متشکل

از 40-mol فسفین در ساعت را ۸۰٪ تبدیل نماید بدست آورید

حل

فرض میکنیم $S = H_2, R = P_4, A = PH_3$ بنابراین معادله شیمیایی خواهد شد :



$$-r = (10/\text{hr})c_a$$

حجم راکتور از معادله ۱۷ بدست می آید

$$V = F_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dX_A}{-r_A} = F_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dX_A}{kC_A}$$

در فشار ثابت :

$$C_A = C_{A0} \left(\frac{1-X}{1+\varepsilon_A X_A} \right)$$

بنابراین :

$$V = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}} \int_0^{x_A} \frac{1 + \varepsilon_A X_A}{1 - X_A} dX_A$$

پس انتگرال گیری معادله ۲۱ حاصل خواهد شد یا

$$V = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}} \left[(1 + \varepsilon_A) \ln \frac{1}{1 - X_A} - \varepsilon_A X_A \right]$$

مقادیر تمام اجزا معادله فوق را معین مینماییم

$$F_{A0} = 4 \text{ lb} - \text{mol} / \text{hr}$$

$$k = 10 / \text{hr}$$

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT} = \frac{4.6 \text{ atm}}{(0.729 \text{ ft}^3 \cdot \text{atm} / \text{lb} - \text{mol} \cdot R(1660 \text{ R}))} = 0.0038 \text{ lb} - \text{mol} / \text{ft}^3$$

$$\varepsilon_A = \frac{7 - 4}{4} = 0.75$$

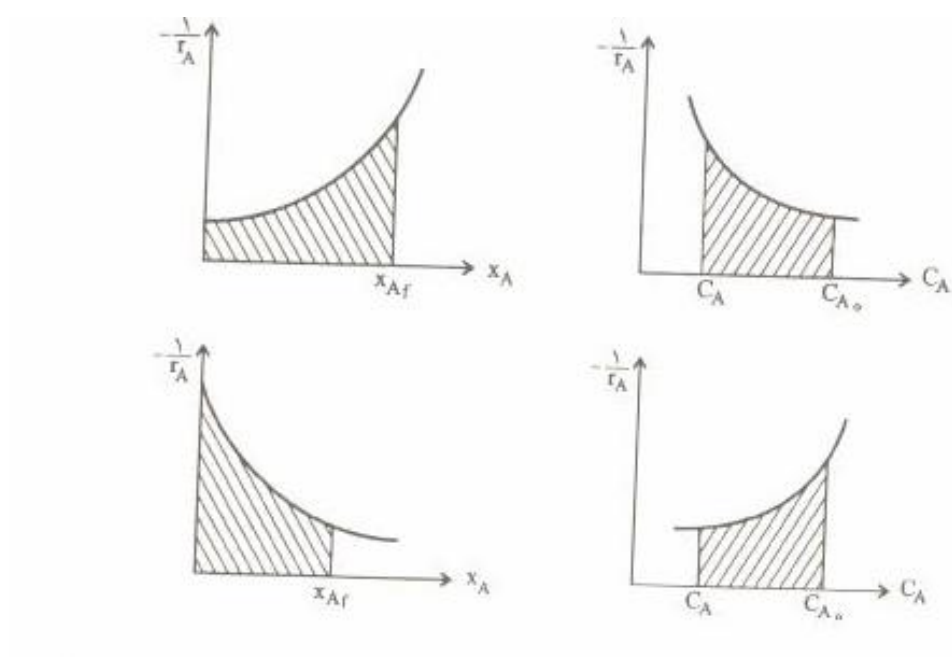
$$X_A = 0.8$$

بنابراین حجم راکتور عبارتست از:

$$V = \frac{4 \text{ lb} - \text{mol} / \text{hr}}{(10 / \text{hr})(0.0038 \text{ lb} - \text{mol} / \text{ft}^3)} \left[(1 + 0.75) \ln \frac{1}{0.2} - 0.75(0.8) \right] = 234 \text{ ft}^3$$

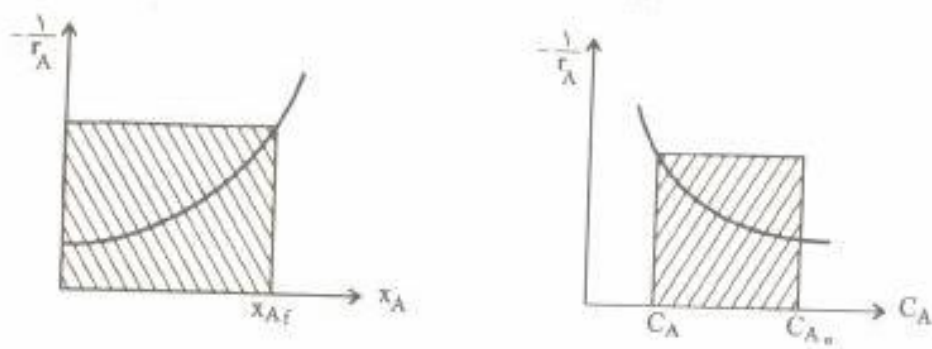
توجه داشته باشید که در راکتور لوله ای حجم راکتور متناسب با سطح زیر منحنی $-\frac{1}{r_A}$

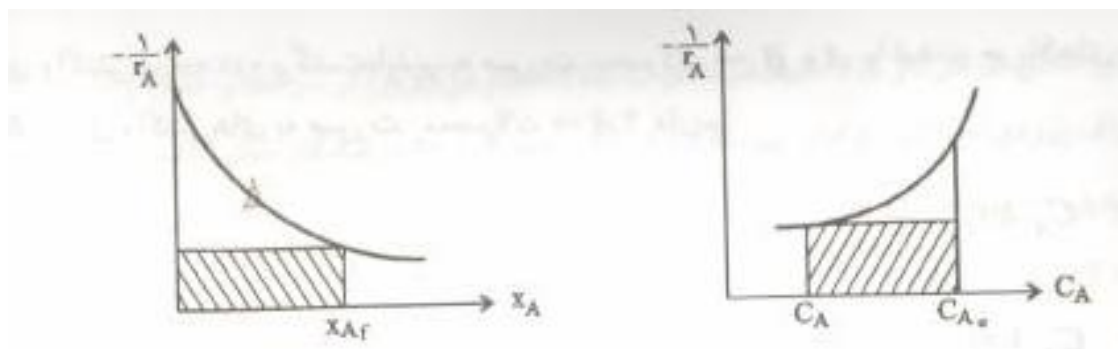
برحسب C_A و یا x_A است یعنی :



ولی در راکتور مخلوط شونده حجم راکتور متناسب است با سطح مستطیلی به اضلاع

$$\frac{1}{-r_A|_{C_A}} \text{ و } C_{A_0} - C_A \text{ یا مستطیلی به اضلاع } \frac{1}{-r_A|x_A}, x_a$$





از مطالب فوق همانطور که بعداً هم اشاره خواهد شد مشخص است که برای واکنش های با $n > 0$ راکتور لوله ای بهتر است و برای واکنش های با $n < 0$ راکتور مخلوط شونده بهتر است .

نکته : در درجه تبدیل های خیلی پایین ($x_A \ll 1$) داریم :

$$V_m \approx V_p, \tau_m \approx \tau_p$$

نکته : با افزایش درجه واکنش و همچنین درجه تبدیل واکنش نسبت های $\frac{t_m}{\tau_p}$ و در

نتیجه $\frac{V_m}{V_p}$ افزایش می یابد .