

مدل‌سازی انتقال جرم فرآیند استخراج مایع - مایع در ستون ضربه‌ای سینی‌دار

ایوب صفری*

تهران، دانشگاه تهران، دانشکده مهندسی شیمی

سید جابر صفری*

تهران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای

حسین ابوالقاسمی

تهران، دانشگاه تهران، دانشکده مهندسی شیمی

چکیده: با استفاده از مدل‌های "پیستونی"، "پراکنده‌گی محوری" و "مدل مرحله‌ای با جریان معکوس" انتقال جرم در یک ستون ضربه‌ای سینی‌دار به طول ۱/۵ متر بررسی شد. نتیجه‌ها با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شد. سامانه‌های مورد استفاده آب/استن/تولوئن و آب/استن/بوتیل استات بود که در آنها جهت انتقال جرم از فاز آلی به فاز آبی است. مدل پیستونی علیرغم سادگی با خطای زیادی همراه است. در مورد سامانه بوتیل استات به دلیل انتقال جرم زیاد تغییرهای غلظت در قسمت پایین ستون زیاد است که باعث ایجاد خطای زیاد در مدل‌های پراکنده‌گی محوری و مرحله‌ای با جریان معکوس می‌شود. خطای مدل‌ها در تخمین توزیع غلظت در فاز پیوسته بیشتر از پراکنده است.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی انتقال جرم، جریان پیستونی، پراکنده‌گی محوری، جریان معکوس، ستون ضربه‌ای سینی‌دار.

KEY WORDS: Mass transfer modeling, Plug flow, Axial dispersion, Stage-wise backflow, Pulsed sieve -plate column.

مقدمه

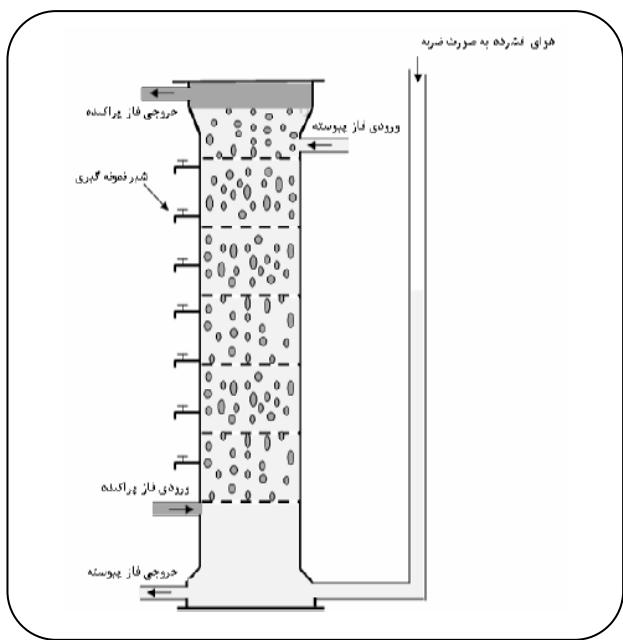
در ستون‌های با جریان متقابل از دو مایع غیر قابل امتصاف می‌افتد. ستون ضربه‌ای از جمله مهم‌ترین ستون‌های استخراج هستند که در انواع دیسک - دونات^(۱)، پرشده و سینی‌دار وجود دارد. ایجاد ضربه سبب می‌شود فاز پراکنده با سرعت به موانع درون ستون برخورد کند

استخراج مایع - مایع یکی از مهمترین روش‌های جداسازی در صنعت و به ویژه در صنعت هسته‌ای می‌باشد. در این فرایند، مایعی که ماده‌ای در آن حل شده است با یک مایع دیگر مجاور می‌شود و جزء حل شونده به مایع دوم منتقل می‌شود. این فرایند به‌طور غالب

*عهده دار مکاتبات

• نشانی فعلی: فارس، لامرد، دانشگاه آزاد اسلامی واحد لامرد

(۱) Discs and doughnuts



شکل ۱- ستون ضربه‌ای سینی‌دار.

در حرکت بالا رونده ضربه، قطره‌های فاز سبک با عبور از سوراخ‌های سینی درون فاز سنگین (که در بالای سینی تجمع کرده) پراکنده می‌شود و در زیر سینی بالاتر به هم می‌پیوندند. در حرکت پایین رونده، فاز سنگین از سوراخ‌های سینی عبور می‌کند و در فاز سبک که در زیر سینی تجمع کرده پخش می‌شود. بنابراین برای عبور جریان به پایین ریز و سایر تجهیزات مورد استفاده در ستون‌های معمولی، احتیاجی نیست.

آزمایش‌ها بر روی ستون شیشه‌ای به طول ۱/۵ متر و قطر ۵ سانتیمتر با ۱۸ سینی از جنس فولاد انجام شده است [۷]. در این ستون دو سامانه آب/استن/تولوئن و آب/استن/نرمال - بوتیل استنات مورد استفاده قرار گرفته که در هر دو آب فاز پیوسته و استن جزء حل شونده است و جهت انتقال جرم از فاز پراکنده (آلی) به فاز پیوسته (آبی) است. ویژگی‌های فیزیکی سامانه‌ها در جدول ۱ آمده است. جدول ۲ شرایط عملیاتی که برای هر یک از سامانه‌ها استفاده شده است را نشان می‌دهد. طبق شکل ۱ برای تعیین غلظت در طول ستون ۷ شیر نمونه‌گیر نصب شده که پس از رسیدن ستون به حالت پایا با باز کردن این شیرها مایع از ستون خارج و وارد طروف نمونه‌گیری می‌شود. بلاfacسله بعد از دو فاز شدن فاز آلی و آبی را از هم جدا کرده و حجم هر کدام از فازها اندازه‌گیری می‌شود

(۱) Von Berg and Wiegandt

(۲) Ettouney

و در اثر متلاشی شدن اندازه قطره‌ها کاهش یابد. با کوچک شدن اندازه قطرات انتقال جرم افزایش می‌یابد. در یک تحقیق وُن بِرگ و ویگانت^(۱) [۱] نشان دادند که ارتفاع لازم برای یک ستون پرشده، در صورت وجود ضربه می‌تواند تا حدود ۳۰٪ کاهش یابد. علاوه بر این از آنجا که در ستون ضربه‌ای اجزاء متحرک وجود ندارد، و به اصطلاح ستون به صورت یکپارچه است به تعمیر و نگهداری کمتری احتیاج دارند لذا در مواردی که با مواد خورنده یا رادیواکتیو سر و کار باشد از آن استفاده می‌شود.

پیش از ساخت یک ستون در مقیاس صنعتی لازم است که ارتفاع مورد نیاز، عملکرد و نحوه توزیع غلظت حل شونده در راستای محوری و شعاعی مشخص باشد. لذا به کمک داده‌های غلظت ستون‌های آزمایشگاهی یا نیمه‌صنعتی و بر اساس مدل‌های موازن جرم و با داشتن شرایط عملیاتی و مشخصات هر ستون، تعییرهای غلظت را در راستای شعاعی و محوری پیش‌بینی می‌کنند و یا ضرایب انتقال جرم را به دست می‌آورند.

اکثر مدل‌های انتقال جرم در حالت پایا بررسی می‌شوند، مورالس^(۲) و همکاران [۲] با به کارگیری مدل پراکنده محوری تأثیر موجودی فاز پراکنده را بر روی انتقال جرم در ستون پرشده با پرکن منظم بررسی کردند. اتونی^(۳) و همکاران [۳] با فرض اینکه اندازه قطره‌ها فاز پراکنده یکنواخت است جریان این فاز را به صورت پیستونی در نظر گرفتند و فرض کردند که فاز پیوسته در فواصل بین سینی‌ها اختلاط کاملی دارد [۲-۴] [۵] برخی از مدل‌ها به صورت دینامیک ارایه شده است [۶ ، ۷]

که کارایی آنها در موارد از کار افتادن^(۴) و شروع مجدد دستگاه است. اگرچه این مدل‌ها به تساوب در کارهای پژوهش‌گران آورده شده و از آنها برای یافتن ضرایب انتقال جرم و گاهی برای یافتن توزیع زمان ماند فاز پیوسته استفاده شده است اما در رابطه با بررسی برتری آنها نسبت به یکدیگر کاری چندانی صورت نگرفته است. در این مقاله با استفاده از مدل‌های انتقال جرم پیستونی، پراکنده محوری و مرحله‌ای با جریان معکوس منحنی غلظت بر حسب ارتفاع در ستون ضربه‌ای سینی‌دار پیش‌بینی و نتیجه‌های داده‌های تجربی مقایسه می‌شوند.

بخش تجربی

شکل ۱ نمای کلی یک ستون ضربه‌ای سینی‌دار را نشان می‌دهد.

(۲) Morales

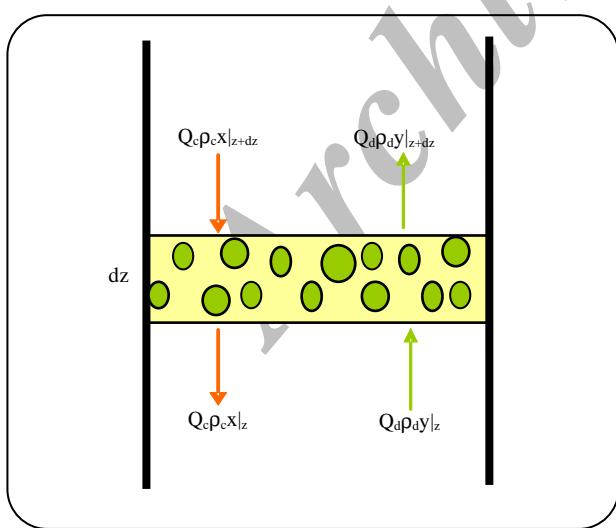
(۴) Shutdown

جدول ۱- مشخصات فیزیکی سامانه‌ها.

آب/ استن/ تولوئن	آب/ استن/ بوتیل استات	
۹۹۲	۹۹۳	چکالی فاز پیوسته (کیلوگرم بر متر مکعب)
۸۵۹	۸۷۵	چکالی فاز پراکنده (کیلوگرم بر متر مکعب)
۱,۱۳	۰,۹۷۵	ویسکوزیته فاز پراکنده (میلی پاسکال در ثانیه)
۰,۵۷	۰,۶۸	ویسکوزیته فاز پراکنده (میلی پاسکال در ثانیه)
۱,۱۷۵	۱,۱۶۳	نفوذ مولکولی فاز پیوسته (میلیمتر مربع بر ثانیه)
۲,۸۲۵	۲,۳۷۵	نفوذ مولکولی فاز پراکنده (میلیمتر مربع بر ثانیه)
۰,۷۸۶	۱,۰۱۳	ضریب توزیع جزء حل شونده
۰,۰۲۸	۰,۰۱۳	کشش سطحی (نیوتون در متر)

جدول ۲- شرایط عملیاتی سامانه‌ها.

آب/ استن/ تولوئن	آب/ استن/ بوتیل استات	
۳,۰۱	۴,۹۸	جریان حجمی دی فاز پیوسته (سانتی متر مکعب بر ثانیه)
۲,۸۹	۲,۱۴	جریان حجمی فاز پراکنده (سانتی متر مکعب بر ثانیه)
۰,۰۰	۰,۰۰	غلظت ورودی فاز پیوسته (در صد وزنی)
۳,۰۲	۳,۰۱	غلظت ورودی فاز پراکنده (در صد وزنی)
۲,۶	۲,۰	فرکانس ضربه (بر ثانیه)
۱,۵	۱,۵	دامنه ضربه (سانتیمتر)
۰,۲۶۴	۰,۱۵۴	اندازه قطره (سانتیمتر)
۰,۱۳۴	۰,۰۹۲	موجودی فاز پراکنده



شکل ۲- موازنۀ جرم جزء حل شونده در ارتفاع dz از سطون بر اساس مدل جریان پیستونی.

(و از این طریق موجودی فاز پراکنده که نسبت حجم فاز پراکنده به مجموع حجم دو فاز است محاسبه می‌شود) و با استفاده از یک دستگاه کروماتوگرافی گازی^(۱) غلظت استن در هر فاز به دست می‌آید.

مدل سازی انتقال جرم

در این مقاله تمام مدل‌های موازنۀ جرم در حالت پایا نوشته شده و فرضیات زیر در نظر گرفته می‌شود:

- شدت جریان هر دو فاز در طول ستون ثابت است. زیرا دو فاز قبلاً از هم اشیاع شده‌اند و غلظت حل شونده کم است.
- مقدارهای سرعت لغزشی، اندازه متوسط قطرات، موجودی فاز پراکنده و ضرایب انتقال جرم در طول ستون ثابت در نظر گرفته شده است و قطره‌های فاز پراکنده کروی است.
- تعادل خطی فرض شده است ($y = mx^*$).

(۱) Gas chromatograph

معادله‌های دیفرانسیل (۴) و (۵) با استفاده از روش عملگر^(۲) به طور تحلیلی قابل محاسبه هستند.

- از تغییر دما در طول ستون صرفنظر شده بنابراین ویژگی‌ها فیزیکی ثابت است.

$$X(Z) = \frac{\Omega(Exq(\Gamma Z) - Exq(\Gamma))}{1 - \Omega Exq(\Gamma)} \quad (7)$$

$$Y(Z) = \frac{1 - Exp(\Gamma Z)}{1 - \Omega Exp(\Gamma)} \quad (8)$$

که در آن Γ و Ω ثوابت بدون بعد هستند.

مدل پراکندگی محوری^(۳)

اصل این مدل به تئوری دنکورتس [۸] باز می‌گردد. طبق نظر دنکورتس پراکندگی (اختلاط) محوری را می‌توان یک فرآیند نفوذ گردانه‌ای^(۴) فرض کرد و برای بیان آن کافی است در معادله نفوذ فیک، ضریب نفوذ مولکولی (D) با یک پارامتر ضریب پراکندگی E جایگزین شود. در مدل جریان پیستونی نفوذ گردانه‌ها که می‌تواند در انتقال جرم هر کدام از فازها موثر باشد در نظر گرفته نمی‌شود، این نفوذ ناشی از تغییرهای سرعت فازها به علت وجود موانع (جاده ستون، سینی‌ها و ...) در مسیر جریان است. همچنین همراه بری یک فاز توسط فاز دیگر برای مثال، همراه بری قطره‌های کوچک فاز پراکنده توسط فاز پیوسته و یا حمل فاز پیوسته به دنبال قطره‌های فاز پراکنده از ایجاد جریان به‌طور کامل پیستونی در ستون جلوگیری می‌کند.

ضریب پراکندگی فقط در راستای محور ستون است و در جهت شعاعی فرض بر این است که سرعت فازها یکنواخت است. شکل ۳ برای ارتفاع dz موازن جرم جزء حل شونده در فاز پیوسته را نشان می‌دهد.

$$\begin{aligned} & Q_c \rho_c x|_{z+dz} - Q_c \rho_c x|_z \\ & + E_c \rho_c S(1-\phi) \left. \frac{dx}{dz} \right|_z - E_c \rho_c S(1-\phi) \left. \frac{dx}{dz} \right|_{z+dz} \\ & - K_{oc} a p_c (1-\phi) S dz (x - x^*) = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} & Q_d \rho_d y|_z - Q_d \rho_d y|_{z+dz} \\ & - E_d \rho_d S \phi \left. \frac{dy}{dz} \right|_z + E_d \rho_d S \phi \left. \frac{dy}{dz} \right|_{z+dz} \\ & + K_{oc} a p_c (1-\phi) S dz (x - x^*) = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

مدل جریان پیستونی^(۱)

این مدل ساده‌ترین مدل‌سازی ممکن است که در آن جریان هر دو فاز پیوسته و پراکنده در راستای محوری دارای سرعت ثابت است و به عبارت دیگر زمان ماند تمامی اجزای هر جریان در ستون یکسان است و وجود موانع در مسیر جریان باعث تغییر سرعت و یا ایجاد گرادیان سرعت (در راستای محوری و یا شعاعی) نمی‌شود. در یک ارتفاع dz از ستون موازن جرم جزء حل شونده برای فاز پیوسته و پراکنده طبق شکل ۲ چنین است:

$$Q_c \rho_c x|_{z+dz} - Q_c \rho_c x|_z \quad (1)$$

$$- K_{oc} a p_c (1-\phi) S dz (x - x^*) = 0 \quad (2)$$

$$Q_d \rho_d y|_z - Q_d \rho_d y|_{z+dz} \quad (2)$$

$$+ K_{oc} a p_c (1-\phi) S dz (x - x^*) = 0 \quad (2)$$

در موازن‌های (۱) و (۲) دو عبارت نخست مربوط به جایه‌جایی توده هر فاز و عبارت آخر مربوط به انتقال جرم بین فاز پیوسته و پراکنده است. با انتگرال‌گیری از معادله (۱) تعداد واحدهای انتقال و ارتفاع واحدهای انتقال چنین است.

$$NTU_{oc} = \int_{x_{out}}^{x_{in}} \frac{dx}{(x - x^*)} \quad (3)$$

$$HTU_{oc} = \frac{Q_c}{S(1-\phi)K_{oc}a} \quad (4)$$

پس از بدون بعد کردن معادله‌های (۱) و (۲)، معادله‌های دیفرانسیل تغییرهای غلظت‌ها در طول ستون به دست می‌آید.

$$-\frac{dX}{dz} + NTU_{oc} (X + Y - 1) = 0 \quad (4)$$

$$-\frac{dY}{dz} + \frac{NTU_{oc}}{\Omega} (X + Y - 1) = 0 \quad (5)$$

معادله‌های (۴) و (۵) درجه اول هستند و برای حل هر کدام به یک شرط مرزی اولیه نیاز است. با توجه به مشخص بودن غلظت ورودی هر یک از فازها شرایط مرزی چنین است:

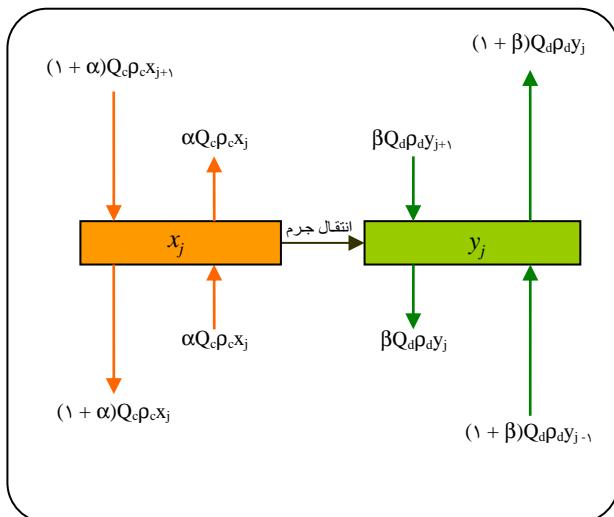
$$X(0) = 0, \quad Y(0) = 0 \quad (6)$$

(۱) Plug flow model

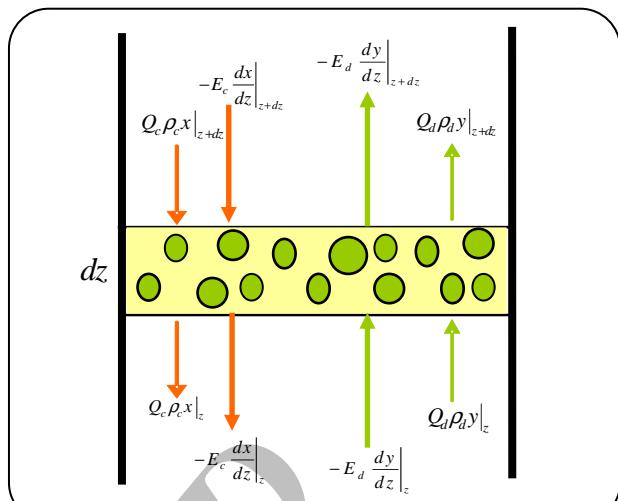
(۲) Axial dispersion

(۳) Operator method

(۴) Eddy diffusion



شکل ۴- موازنۀ جرم جزء حل شونده بر اساس مدل مرحله‌ای با جریان معکوس.



شکل ۵- موازنۀ جرم جزء حل شونده در ارتفاع dz براساس مدل پراکندگی محوری.

مدل مرحله‌ای با جریان معکوس^(۱)

طبق آنچه در شکل ۴ مشاهده می‌شود در این مدل فرض می‌شود که ستون از n مرحله با ارتفاع $\Delta z = H/n$ (n) و با اختلاط کامل تشکیل شده است و در هر مرحله نسبتی از جریان هر فاز (α و β) توسط فاز دیگر همراه بری می‌شود و در جهت معکوس به حرکت در می‌آید. مقدارهای α و β به طور اغلب از طریق بهینه‌یابی به دست می‌آید.

از نوشتن معادله‌های موازنۀ جرم جزء حل شونده در هر مرحله و پس از بی بعد سازی، دستگاه معادله‌های گسسته (۱۵) و (۱۶) حاصل می‌شود.

$$(1+\alpha)X_{j+1} + \alpha X_{j-1} - (1+2\alpha)X_j - \frac{NTU_{oc}}{n} (X_j + Y_j - 1) = 0 \quad (15)$$

$$(1+\beta)Y_{j-1} + \beta Y_{j+1} - (1+2\beta)Y_j + \frac{NTU_{oc}}{n\Omega} (X_j + Y_j - 1) = 0 \quad (16)$$

شرایط مرزی

$$X_{n+1} = 0 \quad (17)$$

$$(1+\alpha)X_r - (1+\alpha)X_i - \frac{NTU_{oc}}{n} (X_i + Y_i - 1) = 0$$

(۱) Stagewise backflow model

در موازنۀ جرم (۹) و (۱۰) عبارت‌های سوم و چهارم نشان دهنده پراکندگی محوری ناشی از انحراف از حالت پیستونی است. معادله‌های (۹) و (۱۰) پس از بدون بعدسازی، به معادله دیفرانسیل جزیی از درجه دوم تبدیل می‌شوند.

$$-\frac{1}{Pe_c} \frac{d^r X}{dZ^r} - \frac{dX}{dZ} + NTU_{oc} (X + Y - 1) = 0 \quad (11)$$

$$\frac{1}{Pe_d} \frac{d^r Y}{dZ^r} - \frac{dY}{dZ} + \frac{NTU_{oc}}{\Omega} (X + Y - 1) = 0 \quad (12)$$

برای حل معادله‌های (۱۱) و (۱۲) به شرایط مرزی در ورودی و خروجی ستون نیاز است. یک شرط مرزی در ورودی فازها به ستون است که همانند شرط مرزی مدل پیستونی است. برای شرط مرزی دوم فرض می‌شود که در خروجی فاز پیوسته و پراکنده جریان به صورت پیستونی برقرار باشد.

$$X(0) = 0, -\frac{dX(0)}{dZ} + NTU_{oc} (X(0) + Y(0) - 1) = 0 \quad (13)$$

$$Y(0) = 0, -\frac{dY(0)}{dZ} + \frac{NTU_{oc}}{\Omega} (X(0) + Y(0) - 1) = 0 \quad (14)$$

در معادله‌های (۱۱) و (۱۲) عدد پکلت یا ضرایب پراکندگی E به طور معمول از روش‌های بهینه‌یابی به کمک داده‌های آزمایشگاهی به دست می‌آیند با وجود اینکه روابط نیمه تجربی نیز به ویژه برای فاز پیوسته، موجود است [۹ و ۱۰].

نتیجه‌ها و بحث

در شکل ۵ نتیجه‌های مدل پیستونی برای سامانه‌های آب/استن/تولوئن و آب/استن/بوتیل استات با داده آزمایشگاهی مقایسه شده است. با توجه به این شکل اگر در ستون رژیم جریان به صورت آرامی یعنی پیستونی باشد بازده انتقال جرم زیاد است چنانچه برای سامانه تولوئن ارتفاع برآورد شده برای کاهش غلظت فاز پراکنده از ۳٪ به حدود ۰/۵٪، توسط مدل پیستونی، حدود ۷۰ سانتی‌متر است در حالی که ارتفاع واقعی ستون ۱۵۰ سانتی‌متر است. همچنین در سامانه بوتیل استات، برای تصفیه کامل استن از فاز پراکنده طبق مدل پیستونی تنها یک سوم از طول ستون (یعنی ۵۰ سانتی‌متر از آن) مورد استفاده قرار می‌گیرد. پس می‌توان گفت مدل پیستونی علیرغم سادگی بین ۵۰ تا ۷۰ درصد خطأ دارد. میوجی و اویا^(۱۳) برای کاهش این خطأ، ارتفاع ستون را از مجموع ارتفاع مدل پیستونی و ارتفاع معادل با اثرهای اختلاط محوری به دست آورده‌اند.

شکل‌های ۶ و ۷ تغییرهای غلظت پیش‌بینی شده توسط مدل‌های پراکنده محوری و جریان معکوس را برای دو سامانه نشان می‌دهد و مقدارهای بهینه‌یابی شده ضرایب در جدول ۳ آورده شده است.

پیش‌بینی مدل پراکنده محوری از غلظت فاز پراکنده تطابق خوبی با نتیجه‌های آزمایش دارد. برای سامانه تولوئن به نسبت سامانه بوتیل استات مدل‌ها تطابق بیشتری با آزمایش دارند. دقیق‌تر در شکل ۶ نشان می‌دهد که در سامانه بوتیل استات تغییر غلظت‌ها در قسمت پایین ستون زیاد است، به طور کلی هر چه اندازه قطرات فاز پراکنده کوچک‌تر باشد سرعت انتقال جرم بیشتر است. در مورد این دو سامانه نیز به دلیل کمتر بودن کشش سطحی، اندازه قطره‌های بوتیل استات کوچک‌تر از قطره‌های تولوئن است و بدین دلیل سرعت انتقال جرم در سامانه بوتیل استات به نسبت بیشتر است که باعث می‌شود درصد زیادی از تغییر غلظت در قسمتی که فاز پراکنده وارد می‌شود (یعنی در پایین ستون) اتفاق بیافتد. این تغییرهای زیاد عمل بهینه‌سازی را با مشکل مواجه می‌کند و دقیق‌تر مدل‌ها را در مورد سامانه بوتیل استات کاهش می‌دهد.

با توجه به شکل‌های ۶ و ۷ به طور کلی پاسخ مدل‌ها برای فاز پیوسته نسبت به فاز پراکنده خطای بیشتری دارد.

$$Y_{\circ} = 0 \quad (18)$$

$$(1+\beta) Y_{n-1} - (1+\beta) Y_n + \frac{NTU_{oc}}{n\Omega} (X_n + Y_n - 1) = 0$$

در هر یک از مدل‌های بالا می‌توان با استفاده از منحنی غلظت تجربی، مقدارهای NTU_{oc} و از روی آن ضریب انتقال جرم را تخمین زد یا اینکه با استفاده از ضرایب انتقال جرم ارایه شده در نشریه‌ها، مقدارهای غلظت در طول ستون را پیش‌بینی کرد. در اینجا روش دوم پیش‌گرفته می‌شود. بدین منظور از میان رابطه‌های فراوانی که در مقاله‌ها ارایه شده است برای محاسبه ضرایب‌های انتقال جرم فاز پراکنده k_d و پیوسته k_c به ترتیب از مدل هندرسون و بارون^(۱) [۱۲] و تئوری نفوذ سطحی هیگبی^(۲) استفاده شده است.

$$k_d = \frac{U_{slip}}{1 + \kappa} \quad (19)$$

$$k_c = \frac{\gamma D_c}{d_{\text{eff}}} \sqrt{\frac{Re Sc_c}{\pi}} \quad (20)$$

ضریب کلی انتقال جرم بر مبنای فاز پیوسته از معادله (۲۱) به دست می‌آید.

$$\frac{1}{K_{oc}} = \frac{1}{k_c} + \frac{1}{mk_d} \quad (21)$$

در رابطه‌ای که تعداد واحدهای انتقال در آن وجود دارد، سطح واحد حجم برای قطره‌های کروی بر حسب اندازه قطره و موجودی فاز پراکنده بیان می‌شود.

$$a = 6\phi/d_{\text{eff}} \quad (22)$$

در این مقاله برای حل دستگاه معادله‌های (۱۱) و (۱۲) از روش حل عددی تفاضل‌های محدود^(۳) و برای محاسبه ضرایب‌های E و α از بهینه‌یابی کمترین مربعات خطأ به کمک معادله‌های (۲۳) و (۲۴) استفاده می‌شود. این بهینه‌یابی توسط نرم‌افزار MATLAB انجام شده است مقادیر بهینه برای E ، α و β در معادله (۲۳) باید طوری تعیین شوند که به ازای آنها b کمترین مقدار ممکن شود. حد بالا و پایین برای این ضرایب‌ها ۰/۵ و ۰/۵ در نظر گرفته شده است.

$$b = \sum_{i=1}^N (x_{i,\text{exp}} - x_{i,\text{model}})^2 \quad (23)$$

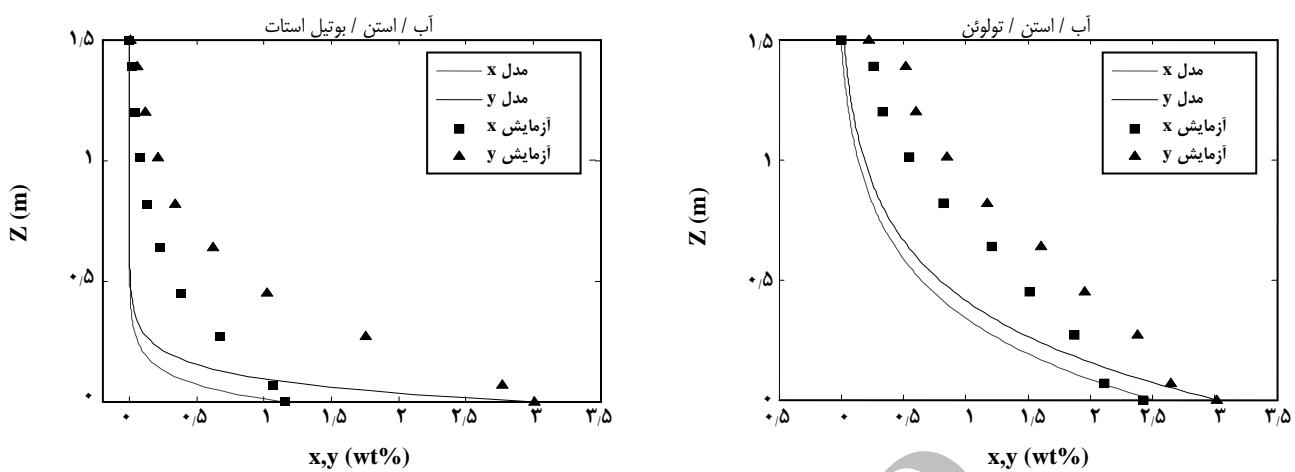
$$\left. \frac{db}{dE} \right|_{E_{\text{opt}}} = 0, \quad \left. \frac{db}{d\alpha} \right|_{\alpha_{\text{opt}}} = 0, \quad \left. \frac{db}{d\beta} \right|_{\beta_{\text{opt}}} = 0 \quad (24)$$

(۱) Handlos and Baron

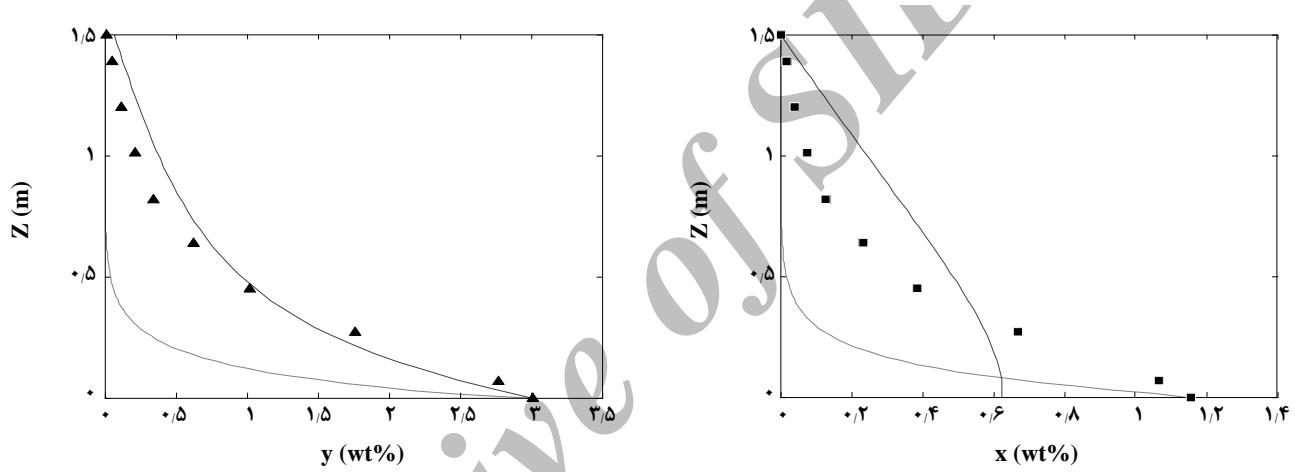
(۲) Higbie

(۳) Finite difference

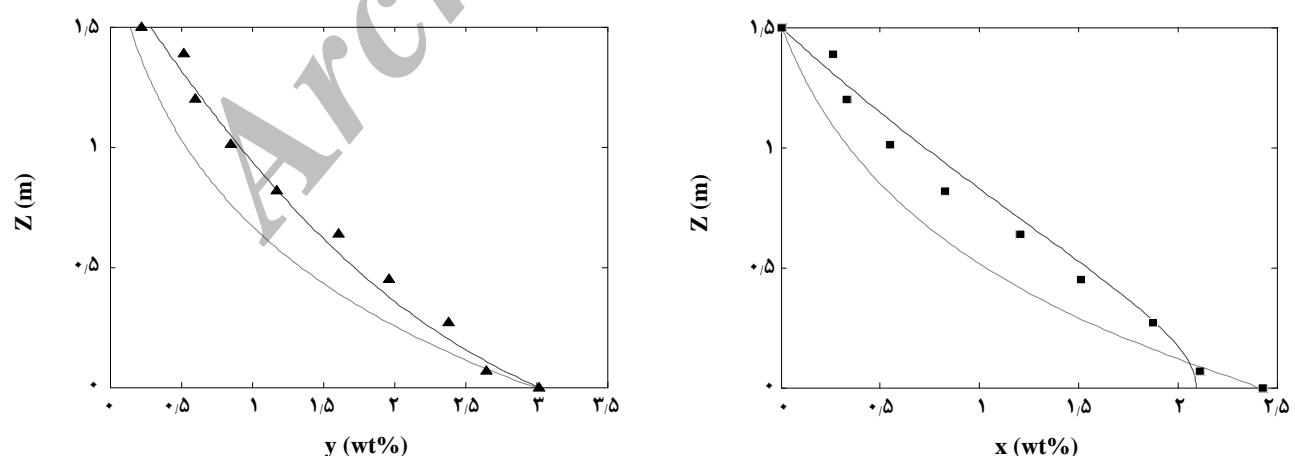
(۴) Miyauchi and Oya



شکل ۵ - تغییرهای غلظت در طول ستون بر اساس مدل پیستونی و مقایسه آن با داده‌های آزمایشگاهی آب/استن و آب/استن/بوتیل استات.



شکل ۶ - تغییرهای غلظت در طول ستون بر اساس مدل‌های پراکندگی محوری(--) و مرحله‌ای با جریان معکوس(...) و مقایسه آن با داده‌های آزمایشگاهی برای سامانه آب/استن/بوتیل استات.



شکل ۷- تغییرهای غلظت در طول ستون بر اساس مدل‌های پراکندگی محوری (--) و مرحله‌ای با جریان معکوس(...) و مقایسه آن با داده‌های آزمایشگاهی برای سامانه آب/استن/تولوئن.

اما عده‌ای از پژوهش‌گران [۱۴ و ۶، ۴] معتقدند تأثیر توزیع اندازه قطرات در انتقال جرم حائز اهمیت است. از این رو مدل اختلاط پیشرو که اساس آن بر روش‌های "موازنۀ جمعیتی قطره" است را ارایه نموده‌اند. در این مدل یک توزیع اولیه برای قطره‌ها در نظر گرفته می‌شود و شکست و ائتلاف قطره‌ها در طول ستون از روش‌های تجربی یا نظری تخمین زده می‌شود و برای فاز پیوسته از یکی از مدل‌های پراکندگی یا اختلاط معکوس استفاده می‌کنند. اما به نظر می‌رسد علاوه بر این در تصحیح فاز پراکنده لازم است توجه بیشتری نیز به فاز پیوسته داشت زیرا همانطور که در این کار نشان داده شد مدل‌های پراکندگی محوری و اختلاط معکوس نیز در مورد فاز پراکنده نتیجه‌های خوبی دارند اما در مورد فاز پیوسته خطای آنها زیاد است.

فهرست نمادها

k	ضریب انتقال جرم (m/s)
K	ضریب انتقال جرم کلی (m/s)
a	مساحت سطح به ازای واحد حجم (m^3/m^3)
A	دامنه ضربه (m)
x	کسر جرمی حل شده در فاز پیوسته (kg/kg)
x^*	کسر جرمی حل شده در فاز پیوسته در تعادل با y (kg/kg)
X	کسر جرمی حل شونده در فاز پیوسته بدون بعد ($x - x_{in}^*/(x_{out}^* - x_{in})$)
y	کسر جرمی حل شونده در فاز پراکنده (kg/kg)
Y	کسر جرمی حل شونده در فاز پراکنده بدون بعد ($y - y_{in}^*/(y_{out}^* - y_{in})$)
f	فرکانس ضربه (s ⁻¹)
Q	جریان حجمی فاز (m^3/s)
m	ضریب توزیع جزء حل شونده $y=mx^*$
S	سطح مقطع ستون (m^2)
D	ضریب نفوذ جزء حل شونده (m^3/s)
d_{32}	اندازه متوسط قطره (m)
U_{Slip}	سرعت خشی (m/s) $= U_d/(1-\phi) + U_c/\phi$
H	ارتفاع ستون (m)
z	ارتفاع (m)
Z	ارتفاع بدون بعد z/H
E	ضریب پراکندگی محوری (m^3/s)
N	تعداد شیرهای نمونه گیری

در فاز پراکنده تنها عامل انحراف از جریان پیستونی توزیع اندازه قطره‌ها است در حالی که در فاز پیوسته توزیع سرعت شعاعی و محوری، همراه بری توسط فاز پراکنده و اختلاط معکوس همگی عامل‌هایی هستند که سبب انحراف از حالت پیستونی می‌شوند به طوری که استفاده از تنها یک پارامتر (α, E_c) برای بهینه‌یابی نمی‌تواند دقت مدل را افزایش دهد. در مورد سامانه تولوئن پاسخ مدل جریان معکوس با مدل پراکندگی محوری به تقریب یکسان است و خطای کمی مشاهده می‌شود اما برای سامانه بوتیل استات جواب هر دو مدل برای فاز پیوسته با خطای همراه است و برای فاز پراکنده نتایج مدل پراکندگی محوری بهتر است.

در طراحی، پیش‌بینی غلظت خروجی از ستون (یعنی غلظت فاز پراکنده در بالای ستون و غلظت فاز پیوسته در پایین ستون) اهمیت بیشتری نسبت به منحنی تغییرهای غلظت در طول ستون دارد. با توجه به شکل هر دو مدل برای فاز پراکنده پیش‌بینی بسیار خوبی از غلظت خروجی دارند خطای مدل پراکندگی محوری برای فاز پیوسته زیاد است و برای سامانه تولوئن حدود ۱۵ و برای سامانه بوتیل استات حدود ۴۵ درصد خطای دارد. در حالی که مدل جریان معکوس تطبیق کاملی با نتیجه آزمایش دارد. در جدول ۳ مقدارهای α و β حد بالای مجاز را اختیار کرده است که از خصوصیات این مدل است. منفی شدن ضربی پراکندگی محوری فاز پیوسته نشان می‌دهد که اختلاط این فاز در جهت معکوس حرکت است که با توجه به وجود موانع در مسیر جریان منطقی به نظر می‌رسد. و برای فاز پراکنده توزیع اندازه قطره‌ها باعث اختلاط در جهت حرکت می‌شود.

نتیجه‌گیری

مدل پیستونی اگرچه نسبت به مدل‌های دیگر آسان‌تر است و دارای روش حل تحلیلی می‌باشد اما خطای آن به نسبت زیاد است و نمی‌توان توزیع غلظت در طول ستون را با آن پیش‌بینی کرد بنابراین کمتر از دو مدل دیگر مورد استفاده قرار می‌گیرد. با توجه به شکل‌های ۶ و ۷ می‌توان گفت مدل‌های پراکندگی محوری و جریان معکوس به خوبی رفتار فاز پراکنده را پیش‌بینی می‌کنند اما در مورد فاز پیوسته، مدل پراکندگی محوری برای پیش‌بینی غلظت خروجی و مدل جریان معکوس در پیش‌بینی توزیع غلظت در طول ستون خطای زیادی دارند. بنابراین باید علاوه بر تأثیر اختلاط، پارامترهای دیگری نیز منظور کرد. برای مثال در این مقاله یک اندازه متوسط برای قطرات فاز پراکنده در نظر گرفته شد

Pe	$Pe_c = Q_c H / S(1-\phi) E_c$	عدد پکلت	HTU	ارتفاع واحد انتقال (m)
Ω	$Pe_d = Q_d H / S\phi E_d$		NTU	تعداد واحد انتقال
Γ	$m Q_d \rho_d / Q_c \rho_c$			
d	$NTU_{oc} \left(1 - \frac{1}{\Omega} \right)$		ϕ	حروف یونانی
c			σ	موجودی فاز پراکنده
o			μ	کشش سطحی (N/m)
in			κ	ویسکوزیته فاز (Pa.S)
out			ρ	نسبت ویسکوزیته فاز پراکنده به پیوسته
opt			α	چگالی فاز (kg/m^3)
			β	کسر جریان برگشتی فاز پیوسته
				کسر جریان برگشتی فاز پراکنده
			Re	اعداد بدون بعد
			Sc	$\rho U_{slip} d_{37} / \mu_c$
				عدد رینولدز d_{37}/μ_c
				عدد اشمت $\mu/\rho D$

تاریخ دریافت: ۱۳۸۷/۹/۳۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۸۷/۷/۶

مراجع

- [1] Von Berg R.L., Wiegandt H.F., Application of Pulsation to Liquid-Liquid Extraction, *Industrial Engineering Chemistry*, **47**, p. 1153 (1954).
- [2] Morales C., Elman H., Perez A., Modeling and Simulation of a Liquid Extraction Column with Structured Packing, *Comput. and Chem. Eng.*, **31**, p. 1694 (2007).
- [3] Ettouney R.S., El-Rifai M.A., Ghallab A.O., Steady State Modeling of Perforated Plate Extraction Columns, *Chem. Eng. and Proc.*, **46**, p. 713 (2007).
- [4] Tang X., Luo G., Wang J., An Improved Combined Model for Evaluating the Mass Transfer Performances in Extraction Columns, *Chem. Eng. Sci.*, **60**, p. 4409 (2005).
- [5] Yeow Y.L., Doan H.A.N., Doan P.A.N., Pan C.M., A Computer-Based Method of Studying Backmixing with Interstage Deadtime in Solvent Extraction Columns, *Comput. and Chem. Eng.*, **29**, p. 2120 (2005).
- [6] Tang X., Luo G., Li H., Wang J., A Dynamic Interaction Mass Transfer Model for Simulating the Mass Transfer Process in Extraction Columns, *Comput. and Chem. Eng.*, **30**, p. 978 (2006).
- [7] صدری، سید جابر؛ پایان نامه دکتری، دانشگاه تهران، دانشکده فنی، (۱۳۷۹).
- [8] Danckwerts P. V., Continuous Flow Systems: Distribution of Residence Times, *Chem. Eng. Sci.*, **2**, p. 1 (1953).
- [9] Goebel J.C., Booij K., Fortuin J.M.H., Axial Dispersion in Single-Phase Flow in Pulsed Packed Column, *Chem. Eng. Sci.*, **41**, p. 3197 (1986).

- [10] Mak A.N.S., Koning C.A.J., Hamersma P.J., Fortuin J.M.H., Axial Dispersion in Single-Phase Flow in Pulsed Packed Column Containing Structured Packing, *Chem. Eng. Sci.*, **46**, p. 819 (1991).
- [11] Handlos A.E., Baron T., Mass and Heat Transfer from Drops in Liquid-Liquid Extraction, *AIChE J.*, **3**, p. 127 (1957).
- [12] Bousinesq M.J., Calcul du Pouvoir Refroidissant des Courants Fluides, *J Math. Pures appl.*, **6**(1), p. 285 (1905).
- [13] Miyauchi T., Oya H., Longitudinal Dispersion in Pulsed Perforated-Plate Columns, *AIChE*, **11**, pp. 395-402 (1965).
- [14] Kumar A., Hartland S., Computational Strategies for Sizing Liquid-Liquid Extractors, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **38**, p. 1040 (1999).

Archive of SID