

مدل‌سازی انتقال جرم قطرات غیر کروی در برج‌های استخراج مایع-مایع

پژوهش‌نفت

سال نوزدهم

شماره ۵۹

صفحه ۲۶-۱۷، ۱۳۸۸

داریوش باستانی^{۱*}، مسعود پناهی^۱ و منصور معظمی^۲

۱- دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت

۲- وزارت نفت

Bastani@sharif.edu

مقدمه

چون فرایند استخراج مایع-مایع یکی از مهمترین فرایندهای صنعتی است، مدل‌سازی هیدرودینامیک و انتقال جرم آن که عمدتاً بین یک قطره و فاز پیوسته اطراف آن است در کتاب‌ها و مقالات به خوبی بررسی شده است. اکثر مدل‌هایی که در مقالات مطرح شده‌اند به محاسبه ضرایب انتقال جرم قطرات کروی شکل منحصراند [۱ و ۲]. اخیراً باستانی و شاه عالمی، با فرض کروی بودن قطرات، با استفاده از ژنتیک الگوریتم، ضرایب انتقال جرم و اختلاط محوری را در یک برج RDC پیش‌بینی کرده و مدعی شده‌اند که روش جدید نتایج بهتری را برای عملکرد برج پیش‌بینی می‌کند [۳]. علی‌رغم این مطلب، بعضی از محققان معتقدند که این قطرات کروی نیستند و یا در مسیر حرکت خود نوسان می‌کنند و یا مرتب تغییر شکل می‌دهند [۴-۶]. یکی از عوامل مؤثر بر مقدار انتقال جرم بین یک قطره و محیط پیوسته اطراف آن، سطح تماس آن با فاز مجاور است. با تغییر شکل یک قطره، سطح تماس آن مرتباً تغییر می‌کند که می‌تواند بر اختلاط داخل قطره نیز اثر بگذارد و ضریب انتقال جرم را افزایش دهد. در اثر این افزایش،

چکیده

در این مقاله مدل تئوری پیش‌بینی ضریب کلی انتقال جرم بر مبنای فاز پراکنده، هنگامی که قطرات به صورت غیرکروی و شبیه به بخشی از یک بیضی یا کره باشند، بیان و سپس نتایج این مدل با نتایج تجربی و نتایج مدل هندلوس و بارون مقایسه شده است. ابعاد قطرات کلاهکی شکل در مدل جدید با بهینه کردن نتایج مدل و داده‌های آزمایشگاهی به دست آمده است. برای مدل‌سازی هیدرودینامیک داخل برج، از مدل اولنی و برای مدل‌سازی انتقال جرم داخل برج، از مدل اختلاط پیش‌رو استفاده شده است. در روابط هیدرودینامیک، سرعت حد قطرات از معادلات کلی و تریبال محاسبه و برای تعیین اندازه قطرات از داده‌های تجربی استفاده شده است. مقدار پارامتر ۹۵ درصد حد اطمینان در پیش‌بینی تعداد مراحل انتقال و هنگام استفاده از مدل هندلوس و بارون ۳۲/۷۸ است. در حالی که در مدل جدید به ۱۱/۱۱ تنزل می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: ضریب انتقال جرم فاز پراکنده، قطرات غیرکروی، قطرات کلاهکی شکل، استخراج مایع-مایع

که پس از گذاردن D^* در رابطه (۱)، معادله زیر به دست آمد:

$$\frac{\partial y}{\partial z} = \frac{V_s}{2048V_d \left(1 + \frac{\mu_d}{\mu_c}\right) (1 - \xi)} \frac{\partial}{\partial \xi} [(1 - 5\xi + 10\xi^2 - 6\xi^3) \frac{\partial y}{\partial \xi}] \quad (۳)$$

آنها فرض کردند که از مقاومت انتقال جرم در فاز پیوسته می‌توان صرف‌نظر کرد. ولک و اسکالاند^۲ [۷] این معادله را برای ضریب انتقال جرم محدود در فاز پیوسته حل کردند و نشان دادند که غلظت درون هر قطره با رابطه زیر پیش‌بینی می‌شود:

$$y = y_1 \sum_{n=1}^{\infty} B_n Y_n(\xi) \exp \left[-\lambda_n \frac{V_s Z}{128dV_d \left(1 + \frac{\mu_d}{\mu_c}\right)} \right] \quad (۴)$$

B_n ثابت‌های محاسبه شده از شرایط مرزی و λ_n و $Y_n(\xi)$ به ترتیب مقادیر ویژه^۳ و توابع ویژه^۴ معادله استرام-لیوویل^۵ اند که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - 5\xi + 10\xi^2 - 6\xi^3) \frac{dY_n}{d\xi} \right] + \lambda_n (1 - \xi) Y_n = 0 \quad (۵)$$

پس از انتگرال‌گیری در طول ستون، کورشینسکی و کروزیپیتو^۶ [۱] نشان دادند که ضریب انتقال جرم متوسط در طول ستون از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$k_d = -\frac{dV_d}{6Z} \ln \left(2 \sum_{n=1}^{\infty} B_n^2 \exp \left[-\lambda_n \frac{V_s Z}{128dV_d \left(1 + \frac{\mu_d}{\mu_c}\right)} \right] \right) \quad (۶)$$

مقادیر λ_1 تا λ_2 در حالتی که $h=0.05$ است به ترتیب عبارت‌اند از: ۱/۲۲۳، ۱۰/۷۱، ۴۱/۶ و ۳۰۲.

مدل جدید قطرات

قطراتی که در اینجا بررسی شده‌اند، به صورت کلاهک بیضوی^۷ اند.

مشخصات قطرات کلاهک بیضوی

یک قطره کلاهک بیضوی در شکل ۱ نشان داده شده که

مقدار انتقال جرم از قطره یا به قطره افزایش خواهد داشت. در این مقاله با توجه به مشاهدات آزمایشی، از نوسانات شکل قطره صرف‌نظر شده و صرفاً تغییر ضریب انتقال جرم به دلیل تغییر شکل در نظر گرفته شده و قطرات به صورت کلاهکی شکل مدل‌سازی شده‌اند. به کمک این مدل می‌توان با بهینه‌سازی ضریب انتقال جرم، با کمک اطلاعات تجربی از توزیع غلظت ماده منتقل شونده در طول ستون استخراج، شکل تقریبی قطره را که می‌تواند بخشی از یک بیضی باشد پیش‌بینی کرد. در این مقاله، قطرات به صورت کلاهک بیضوی در نظر گرفته و شکل آنها پیش‌بینی شده‌اند. در ادامه، نتایج حاصل از مقایسه تعداد مراحل انتقال پیش‌بینی شده با مدل جدید با نتایج پیش‌بینی شده با مدل هندلوس و براون [۲] برای قطرات کروی مقایسه شده‌اند. ابتدا مدل هندلوس و براون^۱ و سپس این مدل توضیح داده می‌شوند.

مدل هندلوس و براون

این دو محقق در تئوری خود فرض کردند که درون قطره بسیار متلاطم است و با تلفیق حرکات مماسی ناشی از چرخش‌های درون قطره و حرکات شعاعی ناشی از نوسانات قطره، ضریب نفوذ جریان متلاطم را پیش‌بینی کردند. آنها فرض کردند خطوط جریان درون قطره به صورت حلقه‌های کروی است به طوری که اجزای سیال به صورت تصادفی در جهت شعاعی در آنها جابه‌جا می‌شوند و فرایند انتقال جرم این حلقه‌ها انجام و از بقیه حجم قطره صرف‌نظر می‌شود. این مدل به طور کلی برای قطرات نوسانی استفاده می‌شود [۲و۱].

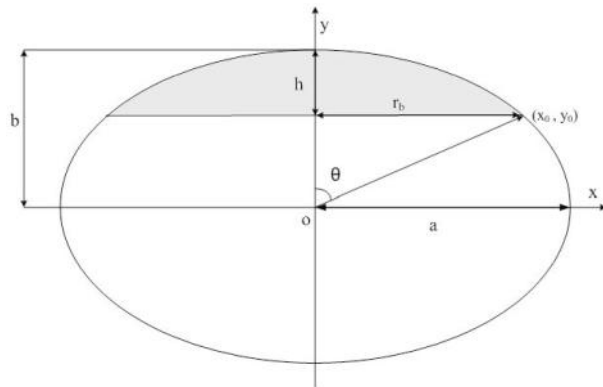
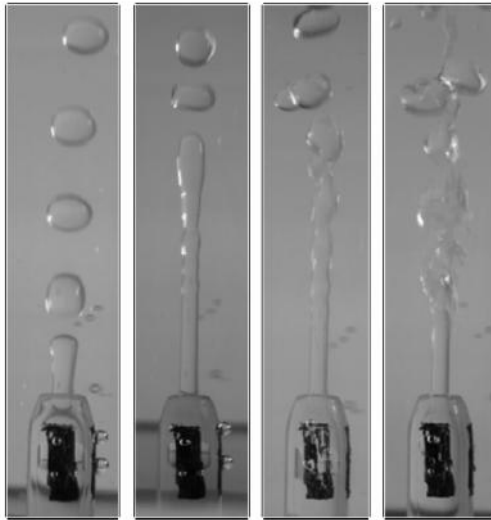
در این مدل، معادله نفوذ به صورت زیر ساده می‌شود:

$$V_d \frac{\partial y}{\partial z} = \nabla \cdot (D^* \nabla y) \quad (۱)$$

D^* نشان دهنده ضریب نفوذ درون قطره است و تأثیرات اختلاط ناشی از چرخش‌های درونی و نوسانات را توصیف می‌کند. در این تحقیق نشان داده شد که D^* از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$D^* = \frac{V_s d}{2048 \left(1 + \frac{\mu_d}{\mu_c}\right)} (1 - 4\xi + 6\xi^2) \quad (۲)$$

1. Handlos and Baron
2. Wellek and Skelland
3. Eigenvalues
4. Eigenfunctions
5. Strum- Liouville
6. Korchinsky and Cruz-Pinto
7. Ellipsoidal Cap



شکل ۱- هندسه یک قطره کلاهک بیضوی [۹]

مساحت سطح قطره کلاهک بیضوی

مساحت سطح این قطره از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$A = 2\pi \int_{y_0}^b x \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dy}\right)^2} dy \quad (12)$$

با دیفرانسیل‌گیری از معادله (۷) و گذاردن آن در معادله (۱۲)، محاسبه سطح با معادله (۱۳) نهایی می‌شود:

$$A = \frac{2\pi a}{b^2} \int_{y_0}^b \sqrt{b^4 + (a^2 - b^2)y^2} dy \quad (13)$$

ضریب انتقال جرم

اگر فاز پیوسته انتقال جرم را کنترل کند و غلظت میانگین قطره بسیار کم باشد، ضریب انتقال جرم کلی (k_{od}) را با گرادیان غلظت محلی در سطح قطره محاسبه می‌کنند. با استفاده از اصل بقای جرم در اطراف سطح قطره رابطه زیر به دست می‌آید [۱۰]:

$$k_{od} = \frac{1}{A} \frac{1}{c_{1,\infty} - c_{1,0}} \iint_A D_i \frac{\partial c_1}{\partial n} dA \quad (14)$$

A سطح قطره، D_i ضریب نفوذ مولکولی در سطح قطره و $c_{1,0}$ و $c_{1,\infty}$ غلظت‌های ماده منتقل شونده در سطح قطره و در فواصل دور از سطح قطره در فاز پیوسته‌اند.

برای حل انتگرال، گرادیان غلظت به صورت زیر فرض می‌شود:

$$\frac{\partial c_1}{\partial n} = \frac{c_{1,\infty} - c_{1,0}}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (15)$$

شامل سه پارامتر r_b ، h و θ است. همه این پارامترها برای محاسبه مساحت سطح و حجم یک قطره کلاهک بیضوی لازم‌اند. معادله شکل یک قطره بیضوی در صفحه x - y به صورت زیر است [۸]:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (7)$$

a و b طول محورها در جهات x و y هستند. نقطه‌ای روی بیضی با مشخصات (x_0, y_0) در شکل ۱ نقطه کنج قطره مایع را نشان می‌دهد و $x_0 = r_b$ و $y_0 = b - h$ است.

مقادیر a و b برحسب پارامترهای کلاهک بیضوی به صورت زیر می‌باشند:

$$a = \frac{r_b(h + s)}{\sqrt{h(h + 2s)}} \quad (8)$$

$$b = h + s \quad (9)$$

که $s = y_0 = r_b \cot \theta$ است.

حجم قطره کلاهک بیضوی

حجم این قطره را می‌توان با چرخاندن منحنی حول محورها در فاصله $y_0 \leq y \leq b$ به دست آورد:

$$V = \pi \int_{y_0}^b x^2 dy = \pi \frac{a^2}{b^2} \int_{y_0}^b (b^2 - y^2) dy \quad (10)$$

بعد از انتگرال‌گیری، حجم قطره برابر خواهد بود با:

$$V = \frac{\pi a^2}{3b^2} (2b^3 - 3b^2 y_0 + y_0^3) \quad (11)$$

به دست می‌آیند. با تغییر این پارامترهای مستقل، شکل و ضریب انتقال جرم قطره تغییر می‌کند. با تغییر شکل و ضریب انتقال جرم قطره، توزیع غلظت فاز پیوسته در طول ستون تغییر می‌کند. اگر توزیع غلظت فاز پیوسته در حالت تئوری و آزمایشگاهی کمترین اختلاف را داشته باشند، پارامتر یا پارامترهای بهینه قطره و در نتیجه شکل بهینه قطره به دست می‌آید.

داده‌های آزمایشگاهی

در این کار از داده‌های آزمایشگاهی باستانی [۱۱] استفاده شده است. وی داده‌های انتقال جرم را برای انتقال جرم با غلظت پایین حل شونده (بین دو تا ده درصد جرمی و به عبارتی شار جرمی کم) برای دو برج RDC با ابعاد مختلف با استفاده از دو سیستم با تنش بین فازی بالا و پایین به دست آورد (جداول ۱ و ۲).

مدل اختلاط پیشرو

در این مدل قطرات به علت تفاوت قطر در راستای حرکتشان سرعت‌ها و زمان‌ماندهای متفاوت خواهند داشت که این مشابه یک اختلاط به سمت جلو است. فاز پیوسته در این تحقیق به صورت جریان پلاگ با اختلاط محوری در نظر گرفته شده است [۱۱].

فرضیات اساسی مدل عبارت‌اند از:

- خواص فیزیکی فازها ثابت و یکنواخت‌اند؛
- تنها یک جزء بین فازها منتقل می‌شود؛
- غلظت جزء حل شونده در هر دو فاز پایین است؛
- ضریب توزیع ثابت است؛

جدول ۱- ابعاد برج‌ها

برج		مشخصات
کوچک (متر)	بزرگ (متر)	
۰/۰۷۶۲	۰/۲۱۹	قطر برج
۰/۷۳۶	۱/۵۰۵	ارتفاع برج
۰/۰۴	۰/۱۱	قطر دیسک
۰/۰۴۵	۰/۱۳۲	قطر استاتور
۰/۰۲۵۴	۰/۰۷۲	ارتفاع هر بخش

1. Oblate Ellipsoidal Cap
2. Prolate Ellipsoidal Cap

شعاع‌های منحنی برای یک قطره متقارن با روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$\frac{1}{R_1} = \frac{-y''}{(1+y'^2)^{3/2}} \quad (۱۶)$$

$$\frac{1}{R_2} = \frac{-y'}{x(1+y'^2)^{1/2}} \quad (۱۷)$$

پس از انتگرال‌گیری از معادله (۱۶) برای قطرات کلاهک بیضوی ممکن است سه حالت اتفاق بیفتد:

۱- اگر $a > b$ باشد، قطره پخ^۱ است و رابطه زیر برای ضریب انتقال جرم درون آن به دست خواهد آمد:

$$k_{od} = \frac{\pi a D_i}{A} \left[\frac{b - y_0}{a} + \frac{a}{\sqrt{a^2 - b^2}} \left(\tan^{-1} \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{b} - \tan^{-1} \frac{y_0 \sqrt{a^2 - b^2}}{b^2} \right) \right] \quad (۱۸)$$

۲- اگر $a < b$ باشد، قطره طویل^۲ است و رابطه زیر برای ضریب انتقال جرم درون آن به دست خواهد آمد:

$$k_{od} = \frac{\pi a D_i}{A} \left[\frac{b - y_0}{a} + \frac{a}{2\sqrt{b^2 - a^2}} \left(\ln \left[\frac{\sqrt{b^2 - a^2} + b}{\sqrt{b^2 - a^2} - b} \right] - \ln \left[\frac{\sqrt{b^2 - a^2} y_0 + b^2}{\sqrt{b^2 - a^2} y_0 - b^2} \right] \right) \right] \quad (۱۹)$$

۳- اگر $a = b$ باشد، قطره کروی و رابطه زیر برای ضریب انتقال جرم درون آن معتبر خواهد بود:

$$k_{od} = \frac{2\pi D_i}{A} (b - y_0) = \frac{2\pi D_i}{A} h \quad (۲۰)$$

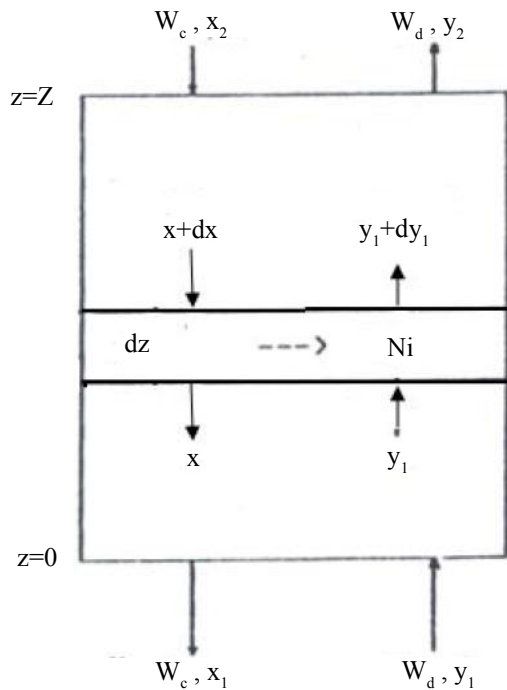
در اینجا فرض شده است که تمام قطرات به صورت کلاهک بیضوی هستند؛ بنابراین از روابط (۱۸) و (۱۹) برای محاسبه ضریب انتقال جرم قطرات استفاده شده است.

بهینه کردن شکل قطرات غیرکروی

فرض می‌شود که حجم قطره با قطر مشخص در اثر تغییرات از حالت کروی به حالت غیرکروی ثابت می‌ماند. با این فرض، شکل بهینه قطره برای حالت غیرکروی به دست آمده است. شکل قطره کلاهک بیضوی شامل دو پارامتر مستقل خواهد بود. با استفاده از توزیع غلظت فاز پیوسته در طول ستون، این پارامترها با بهینه کردن

جدول ۲- خواص فیزیکی مواد در سیستم SI

مشخصات	تولون - استن - آب	بوتانول - اسید سوکسینیک - آب
چگالی فاز پیوسته (kg/m ³)	۱۰۰۰	۹۹۳/۵
چگالی فاز پراکنده (kg/m ³)	۸۶۰	۸۳۵
ویسکوزیته فاز پیوسته (kg/m.s)	۰/۰۰۱	۰/۰۰۱۲۳
ویسکوزیته فاز پراکنده (kg/m.s)	۰/۰۰۰۵۶۸	۰/۰۰۲۹۱
کشش سطحی (N/m)	۰/۰۳۲	۰/۰۰۱۷
ضریب نفوذ مولکولی فاز پیوسته (m ² /s)	۹/۶×۱۰ ^{-۱۱}	۵/۴×۱۰ ^{-۱۱}
ضریب نفوذ مولکولی فاز پراکنده (m ² /s)	۲/۶۷×۱۰ ^{-۹}	۲/۱×۱۰ ^{-۱۱}



شکل ۲- مدل اختلاط پیشرو

در رابطه بالا، $V_{t,i}$ سرعت حد قطرات است که با روابط کلی و تریبال^۲ [۱۳] پیش بینی می شود. در این رابطه C_R ضریب محدودیت است که در برج های RDC با اطلاعات هیدرودینامیکی می توان آن را محاسبه کرد. با توجه به استفاده از مدل اولنی مقدار C_R برای هر آزمایش محاسبه شده است که مقادیر آن ها در مرجع [۱۱] آمده است. با موازنه جرم دیفرانسیلی برای فاز پیوسته، معادله دیفرانسیلی توزیع غلظت در فاز پیوسته در طول ستون به دست خواهد آمد:

- از اثرات برخورد و اختلاط معکوس صرف نظر می شود؛

- ضرایب انتقال جرم محلی، بر حسب زمان تماس قطره با فاز پیوسته، میانگین گرفته می شود؛

- اختلاط کامل در صفحه افقی در فاز پیوسته در نظر گرفته می شود.

موازنه جرم دیفرانسیلی روی یک المان، برای جزئی از فاز پراکنده با قطره ای به قطر d_i و سرعت $V_{d,i}$ ، به صورت زیر است (شکل ۲):

$$g_i W_d dy_i = f_i V_{d,i} \phi S \rho_d dy_i = N_i a_i S dz \quad (21)$$

شار انتقال جرم بین فازها از رابطه زیر به دست می آید:

$$N_i = K_{OD,i} \rho_d (y^* - y_i) \quad (22)$$

با ترکیب معادلات (۲۱) و (۲۲) معادله دیفرانسیل توزیع غلظت در فاز پراکنده در طول ستون به دست خواهد آمد:

$$\frac{dy_i}{d\eta} = \frac{6K_{OD,i}Z}{V_{d,i}d_i} (y^* - y_i) = \frac{Z}{H_i} (y^* - y_i) \quad (23)$$

به طوری که:

$$a_i = \frac{6\phi f_i}{d_i} \quad \& \quad \eta = \frac{z}{Z} \quad \& \quad \frac{1}{H_i} = \frac{6K_{OD,i}}{V_{d,i}d_i} \quad (24)$$

$V_{d,i}$ سرعت قطره نسبت به دیواره برج است که با سرعت خزشی قطره $V_{s,i}$ محاسبه شده است. سرعت خزشی قطره از روابط هیدرودینامیکی اولنی^۱ [۱۲] به دست آمده است. در این مدل $V_{s,i}$ از رابطه زیر محاسبه شده است:

$$V_{s,i} = C_R V_{t,i} (1 - \phi) = V_{d,i} + \frac{V_{c,i}}{1 - \phi} \quad (25)$$

1. Olney

2. Klee and Treybal

$$N_{OD}(\text{pre}) = \frac{1}{\frac{1}{\Lambda} - 1} \ln \left[\frac{1 - E_{OD}}{1 - \frac{E_{OD}}{\Lambda}} \right] \quad (34)$$

m ضریب توزیع و Λ فاکتور استخراج است که از رابطه زیر محاسبه شده است:

$$\Lambda = \frac{\rho_c Q_c}{m \rho_d Q_d} \quad (35)$$

برای محاسبه پارامترهای مجهول ضریب انتقال جرم (ضریب انتقال جرم فاز پیوسته در مدل هندلوس و بارون و پارامترهای شکل قطره در مدل جدید) از تابع fminsearch در نرم افزار Matlab استفاده شده است تا کمترین مجموع مربعات انحراف غلظت توزیع غلظت پیش‌بینی شده و آزمایشگاهی تعیین شود. برای پیش‌بینی تعداد مراحل انتقال جریان پلاگ، به ضریب اختلاط محوری E_c نیاز است. باستانی [۱۱] با استفاده از داده‌های تجربی متعدد برای هر دو ستون و هر دو سیستم، ضریب اختلاط محوری را محاسبه کرده است. در این مقاله از روابط وی برای محاسبه ضریب اختلاط محوری E_c استفاده شده است.

نتایج

خلاصه نتایج تئوری و آزمایشگاهی در جدول ۳ آورده شده است. در شکل ۳، تعداد مراحل انتقال جریان پلاگ برای مدل هندلوس و بارون و مدل جدید مقایسه شده است. مقادیر $N_{ODP}(\text{pre})$ و $N_{ODP}(\text{exp})$ زمانی که از مدل جدید استفاده می‌شود، تطابق بیشتری با هم دارند. مقایسه مجموع مربعات انحراف (جدول ۳)، نیز این موضوع را تأیید می‌کند. ملاک دیگر مقایسه دو مدل، محاسبه ۹۵٪ حد اطمینان^۱ در محاسبه تعداد مراحل انتقال است. با استفاده از اختلاف تعداد مراحل انتقال تئوری و تجربی در هر آزمایش می‌توان حد اطمینان را محاسبه کرد:

$$95\% \text{ Confidence limit} = \pm 2 \sqrt{\frac{\sum (N_{ODP}(\text{exp}) - N_{ODP}(\text{pre}))^2}{n - 1}} \quad (36)$$

$N_{ODP}(\text{pre})$ و $N_{ODP}(\text{exp})$ به ترتیب تعداد مراحل انتقال جریان پلاگ تجربی و تئوری و n تعداد آزمایش‌ها هستند. ۹۵٪ حد اطمینان در پیش‌بینی نتایج در مدل هندلوس و

1. 95% Confidence Limit

$$E_c \rho_c \frac{d^2 x}{dz^2} + \rho_c V_c \frac{dx}{dz} = 6 \rho_d \phi \sum \frac{K_{OD,i} f_i}{d_i} (y^* - y_i) \quad (26)$$

یا:

$$\frac{d^2 x}{d\eta^2} + Pe_c \frac{dx}{d\eta} = \frac{6 Pe_c \phi Z \rho_d}{V_c \rho_c} \sum \frac{K_{OD,i} f_i}{d_i} (y^* - y_i) \quad (27)$$

شرایط مرزی حل معادله عبارت‌اند از:

$$\text{at } \eta = 0 \quad x = x_1 \quad \text{or} \quad \frac{dx}{d\eta} = 0 \quad \& \quad y_i = y_1 \quad (28)$$

$$\text{at } \eta = 1 \quad x = x_2 - \frac{1}{Pe_c} \frac{dx}{d\eta} \quad (29)$$

x_1 و x_2 به ترتیب غلظت‌های خروجی و ورودی جزء حل‌شونده در فاز پیوسته و y_1 غلظت جزء حل‌شونده در فاز پراکنده ورودی است. با تعریف یک متغیر جدید:

$$X = x + \frac{1}{Pe_c} \frac{dx}{d\eta} \quad (30)$$

که غلظت جریان پلاگ را در فاز پیوسته نشان می‌دهد، معادله اخیر به دو معادله دیفرانسیلی درجه اول تبدیل می‌شود:

$$\frac{dX}{d\eta} = Pe_c (X - x) \quad (31)$$

$$\frac{dX}{d\eta} = \frac{6 \rho_d \phi Z}{V_c \rho_c} \sum \frac{K_{OD,i} f_i}{d_i} (y^* - y_i) \quad (32)$$

دو معادله آخر را می‌توان با روش‌های عددی برای مدل‌های مختلف انتقال جرم حل کرد.

روش انجام محاسبات

ضرایب کلی انتقال جرم از معادله (۶) برای مدل هندلوس و بارون و یکی از معادلات (۱۹) یا (۲۰)، برای مدل جدید (با توجه به نسبت طول‌های بزرگ به کوچک بیضی معادل) محاسبه شده است. سپس این ضرایب مستقیم در معادلات (۲۳) و (۳۲) گذارده شده‌اند تا توزیع غلظت در فازهای پیوسته و پراکنده بدست آید. با استفاده از غلظت‌های پیش‌بینی شده، راندمان و تعداد مراحل انتقال جریان پلاگ از روابط زیر محاسبه شده است:

راندمان استخراج پیش‌بینی شده (بر مبنای فاز پراکنده):

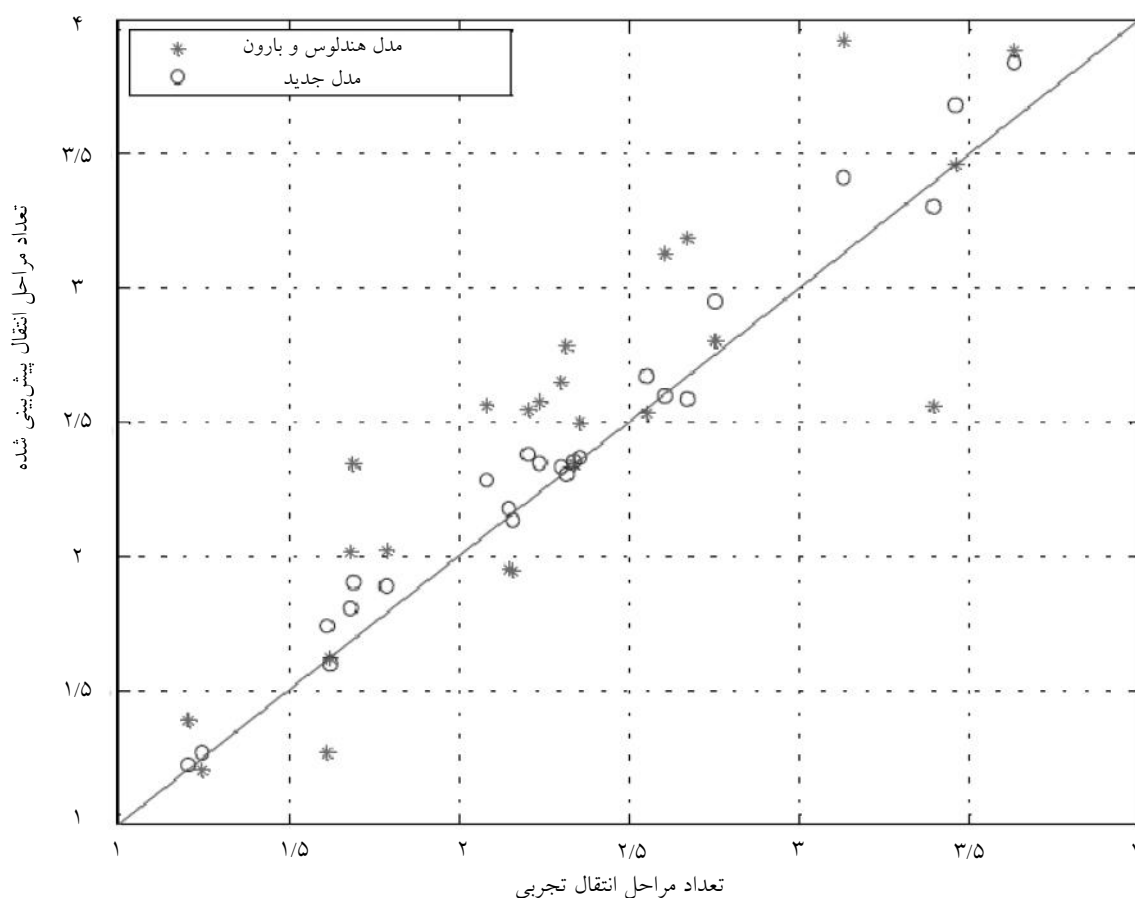
$$E_{OD}(\text{pre}) = \frac{y_2 - y_1}{y^*(x_2) - y_1} = \frac{y_2 - y_1}{m x_2 - y_1} \quad (33)$$

تعداد واحدهای انتقال پیش‌بینی شده (بر مبنای فاز پراکنده):

بارون ۳۲/۷۸ است که در مدل جدید به ۱۱/۱۱ می‌رسد. آزمایشگاهی) در مدل هندلوس و بارون برابر $۵/۱۲۹۳ \times ۱۰^{-۴}$ و در مدل جدید $۲/۳۰۴۶ \times ۱۰^{-۴}$ است. همچنین مجموع کل مربعات انحراف (اختلاف توزیع غلظت تئوری به دست آمده از معادلات با توزیع غلظت

جدول ۳- شرایط عملیاتی و پارامترهای پیش‌بینی شده

مدل جدید		هندلوس و بارون		$N_{ODP}(exp)$	$d_{32}(m) \times 10^3$	$Q_D(m^3/s) \times 10^6$	$Q_C(m^3/s) \times 10^6$	شماره آزمایش
$SSD \times 10^6$	$N_{ODP}(pre)$	$SSD \times 10^6$	$N_{ODP}(pre)$					
۱/۲۸۶۵	۲/۳۴۶۳	۳/۸۹۴۴	۲/۵۷۶۵	۲/۲۳۷۱	۱/۹۶۴	۲۶/۷۰	۲۰/۲۰	۱
۱۵/۱۸۵	۲/۳۵۱۸	۱۶/۴۱۴	۲/۳۴۰۵	۲/۳۳۸۸	۱/۹۹۵	۵۰/۸۰	۲۹/۵۰	۲
۷/۸۵۷۲	۲/۳۳۱۳	۲۳/۰۳۱	۲/۶۵۲۱	۲/۳۰۱۶	۱/۸۶۲	۵۰/۸۰	۲۹/۵۰	۳
۱۶/۳۲	۲/۵۸۶۵	۵۷/۳۶۹	۳/۱۸۵۹	۲/۶۷۱۳	۱/۸۴۳	۵۰/۸۰	۲۹/۵۰	۴
۱۹/۷۱	۲/۱۷۶۳	۳۰/۱۰۶	۱/۹۵۱۸	۲/۱۴۶۵	۲/۰۶۴	۸۰	۴۸/۲۰	۵
۱۳/۱۲۳	۲/۳۶۶۳	۱۷/۳	۲/۴۹۸۹	۲/۳۵۵۱	۲/۱۵۳	۸۰	۴۸/۲۰	۶
۱۰/۴۴۸	۲/۳۰۴۵	۵۳/۳۰۷	۲/۷۸۴۳	۲/۳۱۶۴	۱/۹۷۷	۸۰	۴۸/۲۰	۷
۶/۳۳۹۷	۱/۵۹۹۸	۷/۴۳۳۲	۱/۶۲۰۵	۱/۶۲۲۶	۲/۴۶۲	۲۶/۷۰	۲۰/۲۰	۸
۴/۰۷۱۶	۱/۲۶۸	۶/۷۷۳۷	۱/۲۰۲۳	۱/۲۴۷۱	۲/۹۳	۵۰/۸۰	۲۹/۵۰	۹
۸/۰۹۵۲	۱/۲۲۳	۱۷/۲۷	۱/۳۸۶۹	۱/۲۰۶۴	۲/۹۲	۸۰	۴۸/۲۰	۱۰
۱۵/۱۲۸	۱/۷۴	۶۴/۲۵۶	۱/۲۶۷	۱/۶۱۴۵	۱/۳۴۷	۷/۳۰	۵/۸۰	۱۱
۱۹/۱۴۶	۱/۹۰۲۱	۶۱/۲۴۱	۲/۳۴۳۸	۱/۶۹۱۲	۱/۳۷۲	۷/۳۰	۵/۸۰	۱۲
۲۳/۶۴۶	۲/۲۸۲۵	۳۴/۵۳۳	۲/۵۶۳۳	۲/۰۸۱۷	۱/۵۲۹	۷/۳۰	۵/۸۰	۱۳
۱۶/۱۷۸	۲/۶۷۰۹	۲۵/۹۸۹	۲/۵۳۱۹	۲/۵۵۲۲	۱/۲۳	۷/۳۰	۵/۸۰	۱۴
۱/۰۹۲۴	۲/۱۳۳۲	۲/۳۳۱۱	۱/۹۴۵۱	۲/۱۵۹۵	۱/۹۴۶	۲۱/۲۳	۲۱/۲۳	۱۵
۰/۸۴۴۳	۲/۵۹۸۳	۶/۲۴۰۱	۳/۱۲۷۳	۲/۶۰۵۶	۱/۶۸۵	۲۱/۲۳	۲۱/۲۳	۱۶
۰/۵۲۰۹	۳/۳۰۲۳	۸/۰۰۱۷	۲/۵۶۰۸	۳/۳۹۴	۱/۰۰۷	۲۱/۲۳	۲۱/۲۳	۱۷
۱/۴۲۱۷	۲/۹۴۹	۱/۹۱۲۱	۲/۸۰۴۵	۲/۷۵۳۱	۱/۸۴۶	۳۱/۶۴	۳۸/۶۷	۱۸
۰/۸۳۲۶	۳/۶۸۰۵	۱/۵۲۸۸	۳/۴۵۹	۳/۴۵۸۶	۱/۳۵۱	۳۱/۶۴	۳۸/۶۷	۱۹
۰/۷۸۰۲	۵/۲۲۸۴	۲/۲۵۲۵	۴/۴۴۹۷	۴/۹۶۵	۰/۹۶۱	۳۱/۶۴	۳۸/۶۷	۲۰
۱/۰۰۹۵	۳/۴۱۱۶	۱/۸۳۵	۳/۹۲۰۹	۳/۱۲۸۵	۱/۳۷۹	۴۱/۴۳	۵۷/۲۴	۲۱
۰/۴۰۴۸	۶/۴۵۰۷	۰/۷۱۶۵	۶/۲۹۶۸	۶/۶۰۲۸	۱/۰۰۷	۴۱/۴۳	۵۷/۲۴	۲۲
۱/۱۲۳۲	۷/۷۹۱۷	۱/۷۵۷۹	۹/۲۷۵۴	۸/۱۳۳۵	۰/۸۴۵	۴۱/۴۳	۵۷/۲۴	۲۳
۰/۹۲۱۴	۳/۸۳۷۷	۱/۰۶۳۶	۳/۸۸۲۹	۳/۶۳۰۱	۱/۳۲۱	۳۱/۶۴	۳۸/۶۷	۲۴
۲۴/۷۴۵	۱/۸۰۶۱	۳۷/۸۰۳	۲/۰۱۴۵	۱/۶۸۲۸	۱/۱۹۲	۲/۵۷	۲/۵۷	۲۵
۱۰/۹۰۳	۱/۸۸۹۵	۱۴/۸۴۹	۲/۰۱۹۸	۱/۷۸۸۵	۱/۳۰۵	۲/۵۷	۲/۵۷	۲۶
۹/۳۲۷۱	۲/۳۷۹۳	۱۳/۷۱۷	۲/۵۴۴۳	۲/۲۰۳۸	۱/۰۱۰	۲/۵۷	۲/۵۷	۲۷



شکل ۳- مقایسه تعداد مراحل انتقال برای مدل‌های جدید و هندلوس و بارون

مقدار را دارند و دلیل عمده تفاوت نتایج پیش‌بینی شده با این مدل همین است.

نتیجه‌گیری

۹۵٪ حد اطمینان و همچنین مجموع مربعات انحراف در مدل جدید کمتر از مدل هندلوس و بارون است. بنابراین مدل جدید شرایط انتقال جرم داخل برج را بهتر از مدل هندلوس و بارون پیش‌بینی می‌کند و نشان می‌دهد که شکل قطره تأثیری زیاد در انتقال جرم دارد.

در جدول ۳ مقادیر d_{32} بر اساس نتایجی که باستانی به دست آورده [۱۱] و برای توزیع قطرات کروی به دست آمده‌اند.

در جدول ۴ ضرایب انتقال جرم کلی بر مبنای فاز پراکنده به دست آمده از اطلاعات تجربی، مدل هندلوس و بارون و مدل جدید درج شده‌اند.

در هر دو سیستم، مقادیر ضرایب انتقال جرم با استفاده از مدل جدید کمتر از مدل H-B و تجربی پیش‌بینی شده‌اند. ضمناً مقادیر K_{OD} پیش‌بینی شده با مدل H-B بیشترین

جدول ۴- مقایسه ضرایب انتقال جرم تجربی، مدل H-B و مدل جدید

بوتانول- اسید سوکسینیک- آب	تولون- استن - آب	ضریب انتقال جرم
۲۹/۶	۱۳۶	$K_{OD,exp} (\mu\text{ms}^{-1})$
۳۳/۳۲۰۵	۱۳۹/۷۶۱۱	$K_{OD,H-B} (\mu\text{ms}^{-1})$
۳۲/۶۷۸۳	۱۱۵/۶۳۳۸	$K_{OD,New} (\mu\text{ms}^{-1})$

فهرست علائم

V : حجم فعال ستون	A : مساحت سطح قطره
V_d : سرعت صعود قطره	a : طول بیضی در جهت x
$V_{d,i}$: سرعت قطره نسبت به دیوار برج	b : طول بیضی در جهت y
$V_{s,i}$: سرعت خزشی قطره	C_R : ضریب انقباض
$V_{t,i}$: سرعت حد قطرات	B_n : ثابت تناسب
V_t : سرعت حد	d : قطر قطره
V_s : سرعت خزشی قطره	d_{32} : قطر میانگین قطره
w_d : دبی جرمی فاز پراکنده	D_i : ضریب نفوذ مولکولی در سطح قطره
x : کسر وزنی حل شونده در فاز پیوسته	D^* : ضریب نفوذ موثر در قطرات نوسانی
X : کسر وزنی حل شونده در فاز پیوسته بر مبنای جریان پلاگ	E_c : ضریب اختلاط محوری در فاز پیوسته
y : کسر وزنی حل شونده در فاز پراکنده	E_{OD} : بازده استخراج بر مبنای فاز پراکنده
y^* : کسر وزنی حل شونده در فاز پراکنده در حالت تعادل	f_i : کسر حجمی استاتیک فاز پراکنده، قطره به قطر d_i
z : موقعیت مکانی در جهت عمودی در ستون	g_i : کسر حجمی دینامیک فاز پراکنده، قطره به قطر d_i
Z : ارتفاع کل ستون	H_i : ارتفاع مرحله انتقال بر مبنای قطرات با قطر d_i
η : طول بدون بعد	h : ارتفاع قطره کلاهکی بیضوی
λ_n : مقادیر ویژه	k_c, k_d : ضرایب انتقال جرم فاز پراکنده و پیوسته
μ_c, μ_d : ویسکوزیته فاز پراکنده و پیوسته	k_{od} : ضریب کلی انتقال جرم بر مبنای فاز پراکنده
ρ_c, ρ_d : چگالی فاز پراکنده و پیوسته	N_i : تعداد قطرات با قطر d_i
ξ : محور شعاعی کاهش یافته	m : ضریب توزیع
ϕ : ماندگی فاز پراکنده	N_{ODP} : تعداد واحدهای انتقال جریان پلاگ بر مبنای فاز پراکنده
Λ : ضریب استخراج	Pe : عدد بدون بعد پکلت
θ : زوایه دنباله قطره	Q_c : دبی حجمی فاز پیوسته
	r_b : طول قطره کلاهکی شکل
	S : سطح مقطع ستون

منابع:

- [1] Korchinsky W.J. & Cruz-Pinto J.J.C., "Mass transfer coefficients: calculation for rigid and oscillating drops in Extraction columns", *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 34, pp. 551-561, 1979.
- [2] Handlos A.E. & Baron T., "Mass and heat transfer from drops in liquid-liquid extraction", *A.I.Ch.E.J.*, Vol. 3, pp. 127-136, 1957.
- [3] Bastani D. & Shahalami S.M., "New approach in the prediction of RDC liquid-liquid extraction column parameters", *Chem. Eng. Technol.*, Vol. 7, pp. 971-977, 2008.
- [4] Wellek R.M., Agrawal A.K. & Skelland A.H.P., "Shape of liquid drops moving in liquid media", *A.I.Ch.E.J.*, Vol. 12, pp. 854-862, 1966.
- [5] Farelukis M. & Hungly C., "Unsteady mass transfer around spheroidal drops in potential flow", *Chem.Eng.Sci.*, Vol. 60, pp. 7011-7021, 2005.
- [6] Lochiel A.C. & Calderbank P.H., "Mass transfer in the continuous phase around axisymmetric bodies of revolution", *Chem.Eng.Sci.*, Vol. 19, pp. 471-484, 1964.
- [7] Wellek R.M. & Skelland A.H.P., "Extraction with single turbulent droplets", *A.I.Ch.E.J.*, Vol. 11, pp. 557-560, 1965.
- [8] Yildirim Erbil H. & Alsun meric R., "Evaporation of sessile drops on polymer surfaces: Ellipsoidal Cap Geometry", *J.Phys.Chem.B*, Vol. 101, pp. 6867-6873, 1997.
- [9] Clift R., Grace J.R. & Weber M.E., *Bubbles, drops and particles*, 1st Ed., Academic Press, 1978.
- [10] Yang C. & Mao Z.S., "Numerical simulation of interphase mass transfer with level set approach", *Chem.Eng. Sci.*, Vol. 60, pp. 2643-2660, 2005.
- [11] Bastani D., *Liquid-liquid extraction column performance evaluations for two column diameters and two chemical systems.*, Ph.D.Thesis, Victoria university of Manchester, 1990.
- [12] Olney R.B., "Droplet characteristics in a counter current contactor", *A.I.Ch.E.J.*, Vol. 10, pp. 827-835, 1964.
- [13] Klee A.J. & Treybal R.E., "Rate of rise or fall of liquid drops", *A.I.Ch.E.J.*, Vol. 2, pp. 444-447, 1956.