

ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA

MÔ HÌNH HÓA–MÔ PHỎNG–TỐI ƯU HÓA
TRONG CÔNG NGHỆ HÓA HỌC

MÔ HÌNH HÓA
QUÁ TRÌNH & THIẾT BỊ TRUYỀN KHỐI

TS. Nguyễn Đình Thọ
Bộ môn: Quá trình và thiết bị CN Hóa – Sinh học – Thực phẩm

MÔ HÌNH HÓA–MÔ PHỎNG–TỐI ƯU HÓA TRONG CÔNG NGHỆ HÓA HỌC

MÔ HÌNH HÓA QUÁ TRÌNH & THIẾT BỊ TRUYỀN KHỐI

Giới thiệu mô hình hóa các quá trình và thiết bị truyền khối gồm:

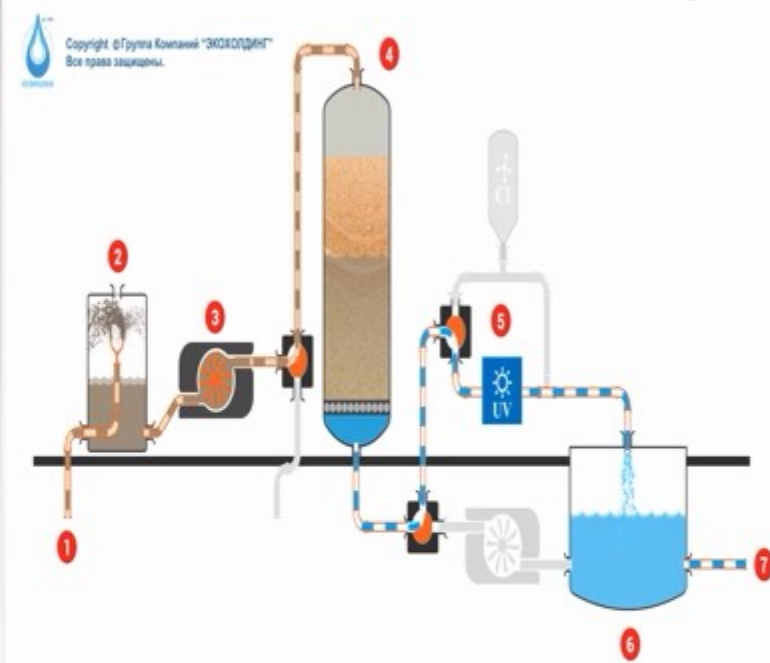
- 1) Cơ sở chung.
- 2) Quá trình và thiết bị hấp thụ: hấp thụ đa biến nhiệt hệ amoniac-nước.
- 3) Quá trình và thiết bị chưng cất: hỗn hợp n cấu tử bằng 2 phương án: n-1 tháp đơn giản; 1 tháp phức tạp.



Mô hình hóa Quá trình và thiết bị truyền khối



1. Phân loại Quá trình và thiết bị truyền khối
2. Cơ sở chung: cân bằng pha ...
3. Mô hình hóa quá trình và thiết bị hấp thụ
4. Mô hình hóa quá trình và thiết bị chưng cất
5. Mô hình hóa quá trình và thiết bị trích ly
6. Mô hình hóa quá trình và thiết bị sấy



Quá trình và Thiết bị Truyền khối:

Quá trình và Thiết bị Truyền khối khá phức tạp, để mô hình hóa cần thiết lập:

- Cân bằng pha
- Thủy động lực
- Truyền nhiệt
- Cân bằng vật chất
- Động học truyền khối

Trong đó: Cân bằng pha đã nghiên cứu kỹ trong Hóa lý.

Thủy động lực: trong mô hình thủy lực cơ sở như trong tháp đĩa: lỏng trên đĩa tuân theo mô hình khuấy lý tưởng, khí (hay) hơi đi trong tháp theo mô hình đẩy lý tưởng

Truyền nhiệt đã khảo sát trong phần mô hình truyền nhiệt.

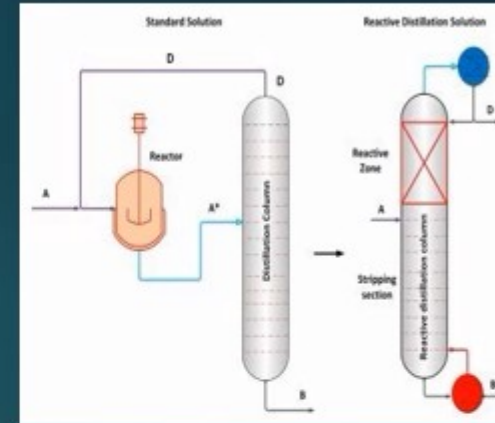
Ở đây chủ yếu xét: cân bằng vật chất \rightarrow đường nồng độ làm việc, để tính động lực quá trình, số đơn vị truyền khối hay số đĩa lý thuyết và số đĩa thực.

động học truyền khối: Hệ số truyền khối, chiều cao của đơn vị truyền khối, chiều cao của đĩa lý thuyết hay hiệu suất đĩa (tháp).

Hai vấn đề cần lưu ý: bề mặt truyền khối là đại lượng khó xác định (bằng thực nghiệm)

quá trình truyền khối có tiếp xúc pha

truyền khối giữa các pha xảy ra do chuyển động nhiệt của các phân tử



1) Cơ sở chung:

- Phương trình cân bằng pha: $\begin{cases} y^* = f(x) \\ x^* = g(y) \end{cases}$ xây dựng bằng định luật nhiệt động, thực nghiệm

- Phương trình cân bằng vật chất: $dM = \begin{cases} -d(Gy) = \pm d(Lx) \\ -Gdy = \pm Ldx \end{cases}$

- Phương trình truyền khối: $dM = K_y(y - y^*)dFdt = K_x(x^* - x)dFdt$

- Truyền khối trong một pha: $dM = \beta_y(y - y_{bm})dF = \beta_x(x_{bm} - x)dF$

- Hiệu suất đĩa: $E = \begin{cases} \frac{y_{n+1} - y_n}{y_{n+1} - y_n^*} \\ \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n^* - x_{n-1}} \end{cases}$

F – diện tích tiếp xúc pha, m^2 ;

Δ – động lực quá trình, ...;

x, y – nồng độ pha y, x ,;

chỉ số i : “ y, x ” – pha y, x ; “*” – cân bằng; n – đĩa (bậc) n .

t – thời gian, s ; δ – bề dày tường, m ;

β_i – hệ số cấp khối – truyền khối 1 pha, (m/s) ;

K_i – hệ số truyền khối giữa hai pha, (m/s) ;

1) Cơ sở chung

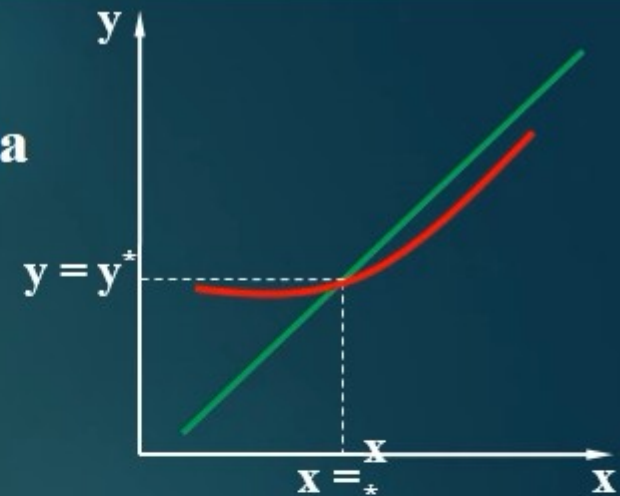
Tính toán quá trình truyền khối ngoài chiều chuyển động giữa hai pha

Cần xét chiều di chuyển của cấu tử khuếch tán:

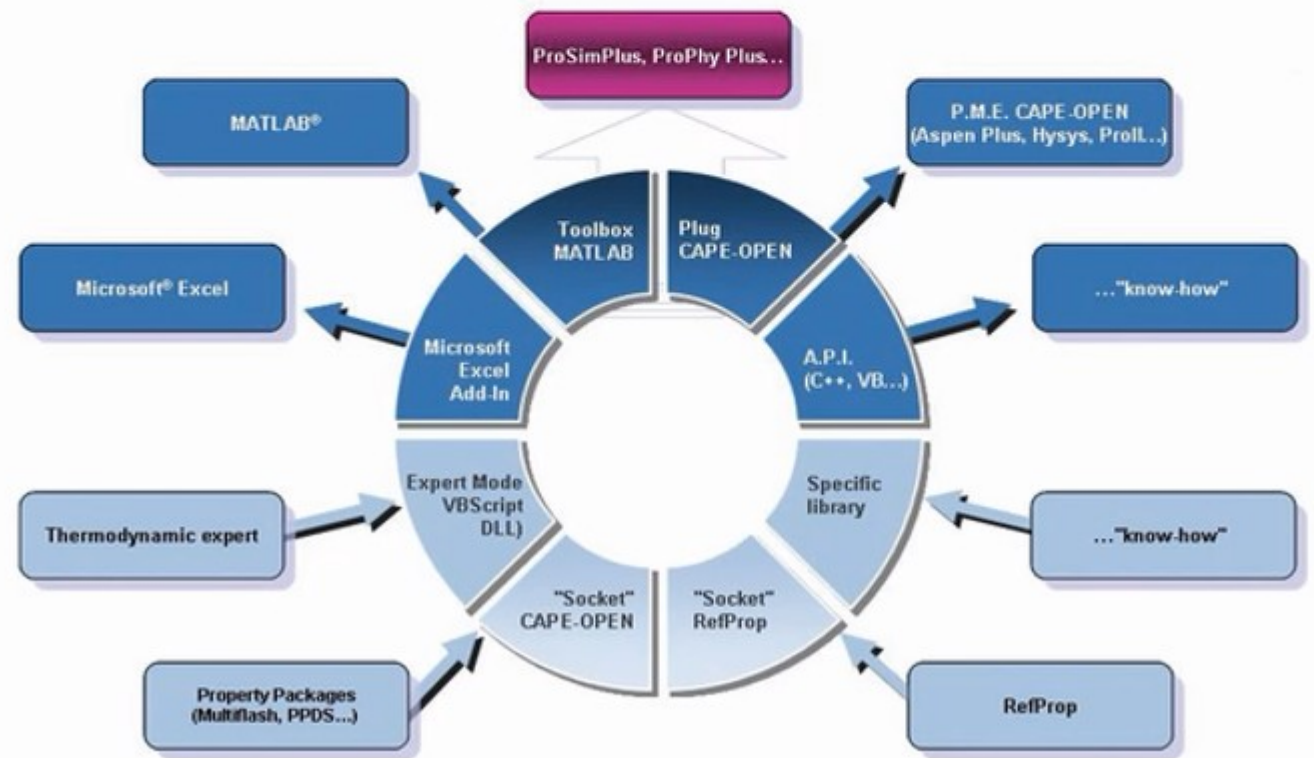
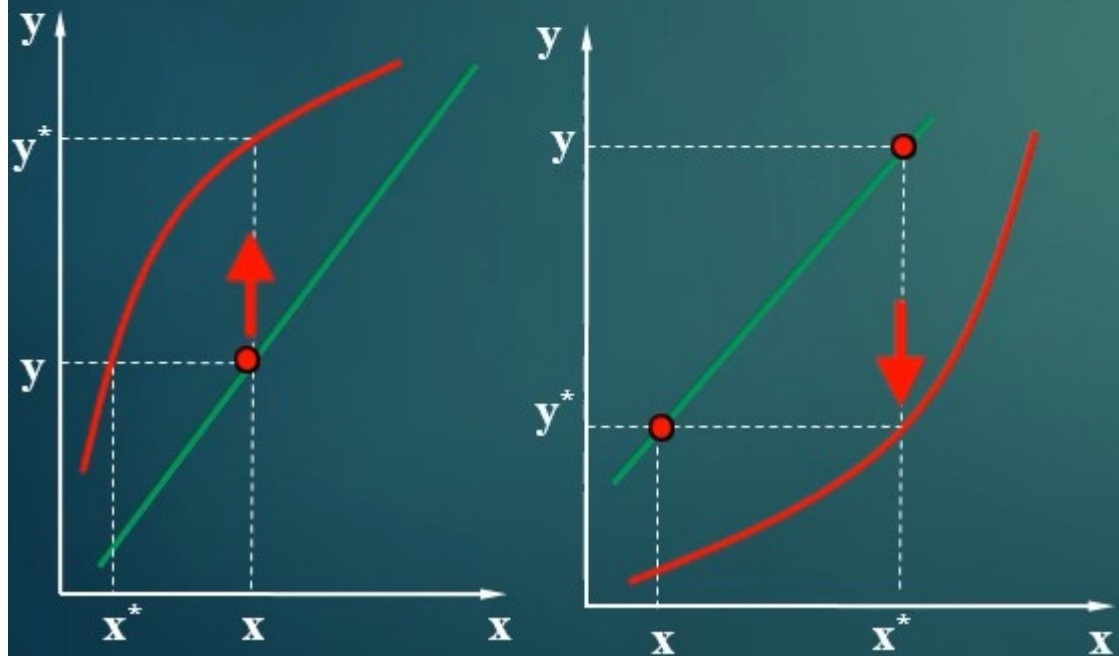
- Đường làm việc nằm trên đường cân bằng: $P_y \rightarrow P_x$

Đường làm việc nằm dưới đường cân bằng: $P_x \rightarrow P_y$

- Đường làm việc cắt đường cân bằng: $P_y \rightleftharpoons P_x$



2) Mô hình hóa cân bằng pha



2. Mô hình cân bằng pha:

Hãy xây dựng đường cân bằng của hệ benzene - toluene ở áp suất khí quyển, nếu hệ tuân theo định luật Raoult?

Sử dụng phương trình Antoine: $\lg P^0 = A - \frac{B}{t+C}$

Với: P – áp suất hơi bão hòa, atm; t – nhiệt độ sôi, °C; A, B, C – hệ số Antoine

Tra bảng với benzen – toluen:	A	B	C
benzen:	6,90565	1211,033	220,790
toluen:	6,95464	1344,255	219,482

Từ công thức và số liệu tính nhiệt độ sôi t °C (ở 1 atm) của benzen: 80,09999
toluen: 110,4916

Nhiệt độ sôi và nồng độ cân bằng của hỗn hợp benzen – toluen tính như sau:

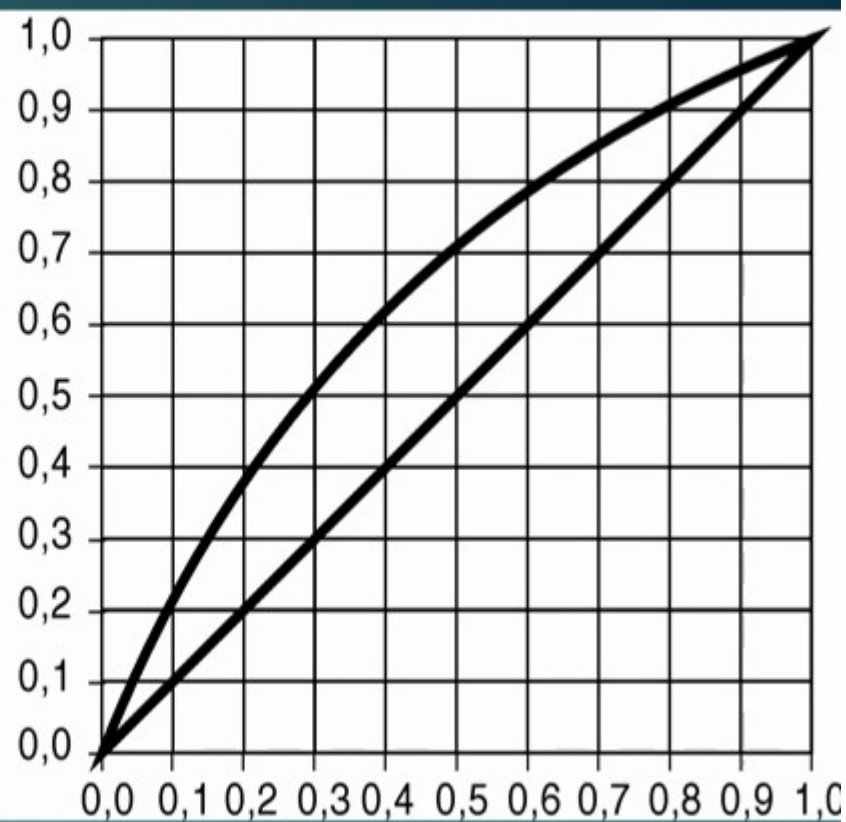
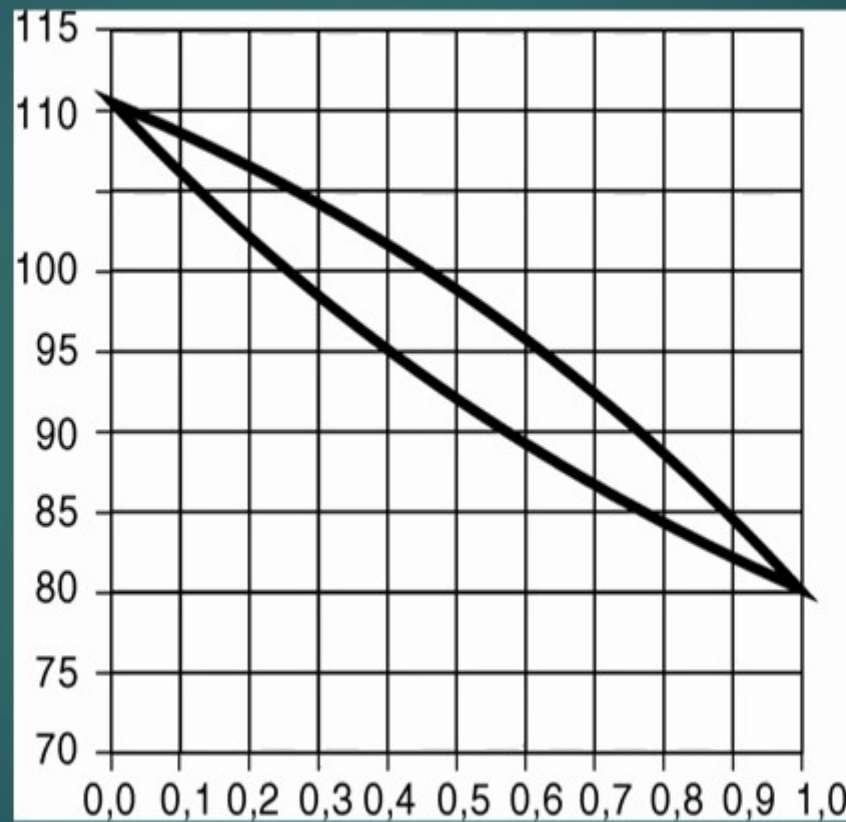
$$x_B = \frac{P - P_T^0}{P_B^0 - P_T^0} \quad x_T = 1 - x_B \quad P_B^0 = 10^{\left[6,90565 - \frac{1211,033}{(t_B + 220,790)}\right]} \quad P_T^0 = 10^{\left[6,95464 - \frac{1344,255}{(t_T + 219,482)}\right]}$$

Từ đó: $\alpha = \frac{P_B^0}{P_T^0} \rightarrow y^* = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x}$

2. Mô hình cân bằng pha:

Kết quả tính toán

t, °C	p_B^0 mmHg	p_T^0 mmHg	x_B	α	y_B^*
80,1	760	293,45	1	2,59	1
82,6	820,31	319,69	0,88	2,57	0,95
85,1	884,31	347,69	0,77	2,54	0,89
87,6	952,13	377,68	0,67	2,52	0,83
90,1	1023,94	409,71	0,57	2,5	0,77
92,6	1099,89	443,88	0,48	2,48	0,7
95,1	1180,14	480,28	0,4	2,46	0,62
97,6	1264,84	519,02	0,32	2,44	0,54
100,1	1354,15	560,21	0,25	2,42	0,45
102,6	1448,25	603,95	0,18	2,4	0,35
105,1	1547,29	650,35	0,12	2,38	0,25
107,6	1651,43	699,52	0,06	2,36	0,14
110,5	1778,48	760	0	2,34	0



3) Mô hình hóa quá trình và thiết bị hấp thụ

- Xây dựng đường hấp thụ: đẳng nhiệt

không đẳng nhiệt

- Từ cân bằng vật chất và phương trình truyền khối:

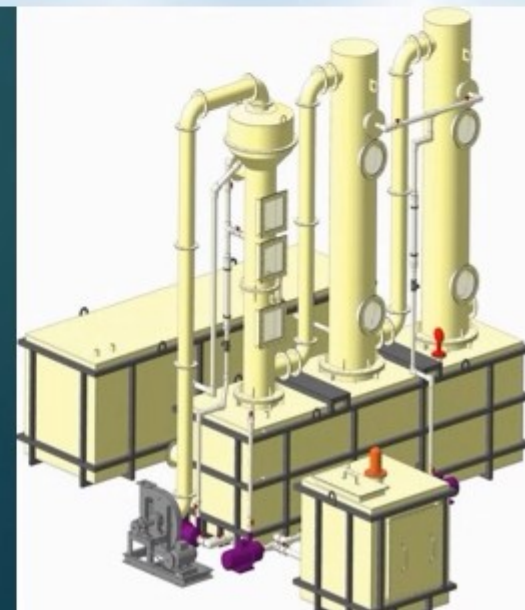
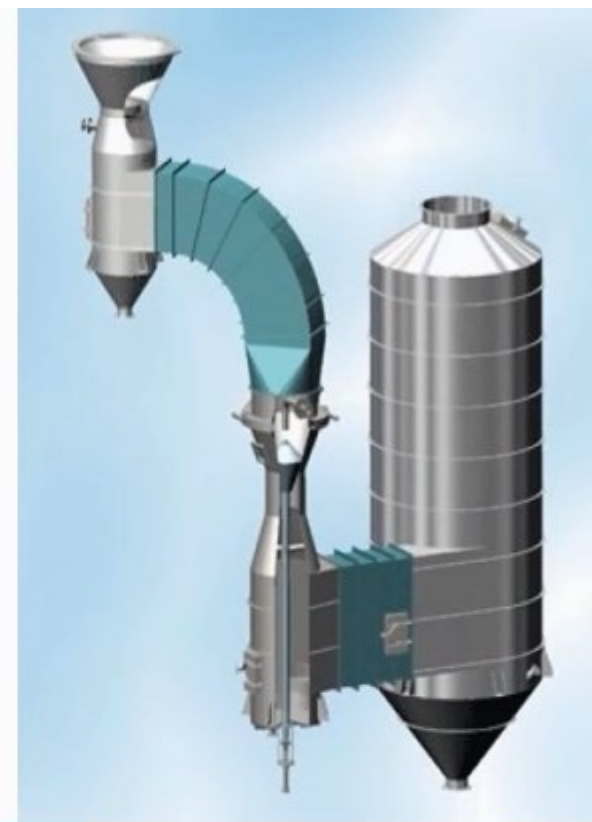
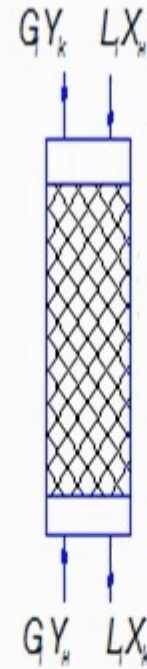
$$H = \int_0^H dh = \int_{y_2}^{y_1} \frac{G}{K_y a S} \frac{dy}{(1-y)(y-y^*)} = n_{0y} h_{0y}$$

$$H = \int_0^H dh = \int_{x_1}^{x_2} \frac{L}{K_x a S} \frac{dx}{(1-x)(x^*-x)} = n_{0x} h_{0x}$$

Khi hấp thụ đa biến nhiệt: $y^* = \frac{K_H(T)}{P} x$

Với NH_3 ở áp suất 101,33 kPa: $K_H(T) = 3,01 - 0,122tT + 5,9 \cdot 10^{-3}T^2$

Mô hình toán có dạng:
$$\begin{cases} dH = \frac{K_a(Y-Y^*)}{G_T} dY \\ dH = \frac{K_a(X^*-X)}{L} dX \\ dT = \frac{K_a(X^*-X)}{LC_p M_{H_2O}} d(\Delta H) \end{cases}$$



3) Mô hình hóa quá trình và thiết bị hấp thụ

- Tính toán với: $L = 1,08 \text{ kmol/h}$

$$G_{\text{TR}} = 0,053 \text{ kmol/h}$$

$$C_P = 4,19 \text{ kJ/kg.K}$$

$$q = 36200 \text{ J/kmol}$$

$$a_2 = 5,9 \cdot 10^{-3}$$

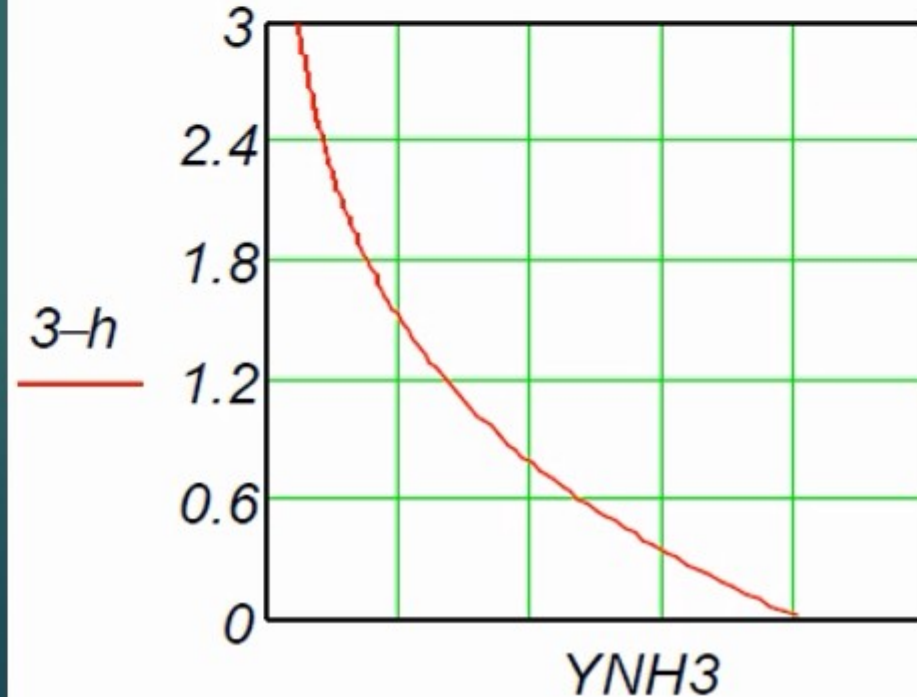
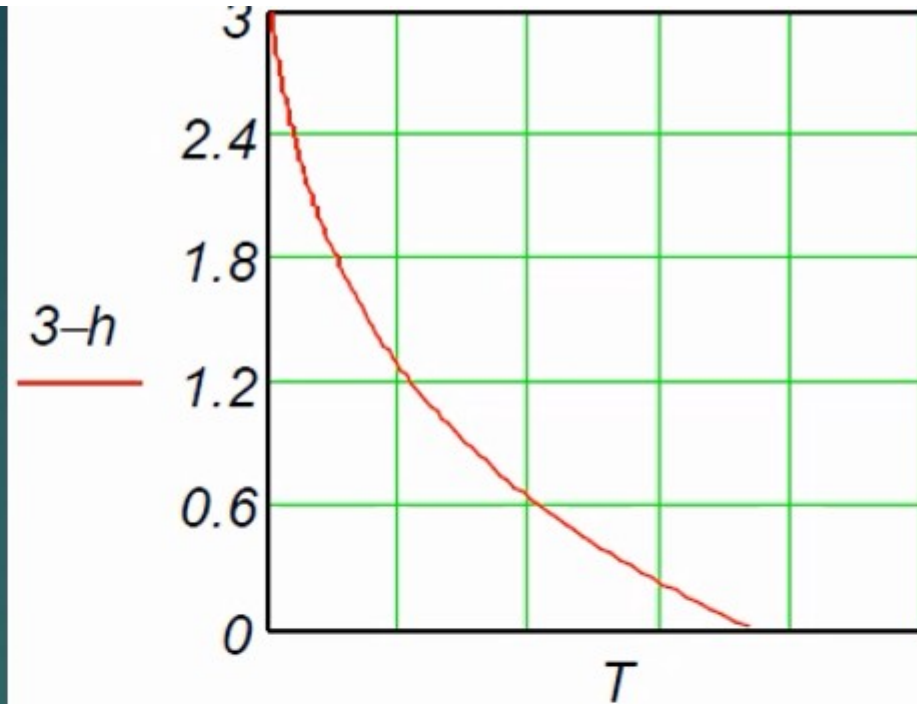
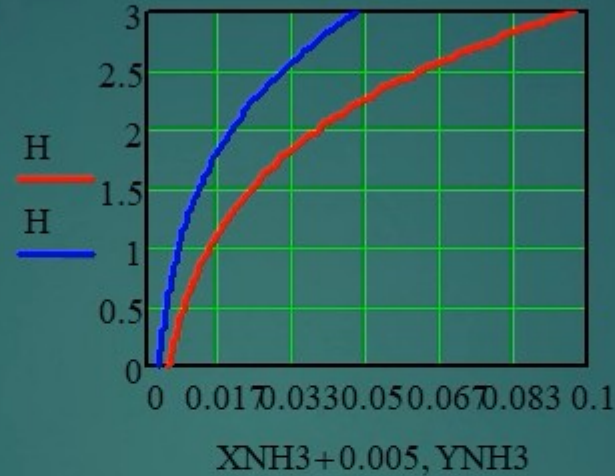
$$a_1 = -0,1227$$

$$a_0 = 3,01$$

$$K_a = 0,113$$

$$P = 101,33 \text{ kPa}$$

Đường cân bằng: $K_H(T) = a_0 + a_1 T + a_2 T^2$



4) Mô hình hóa quá trình và thiết bị chưng cất

Hỗn hợp: nhiều cấu tử khi $n \geq 3$:

đơn giản: n , thành phần các cấu tử đã biết

phức tạp: n , thành phần các cấu tử chưa biết

Giả thiết: $G = \text{const}$, $L = \text{const}$

Pha hơi coi là khí lý tưởng

Lỏng trên đĩa: khuấy lý tưởng

Hơi: đẩy lý tưởng

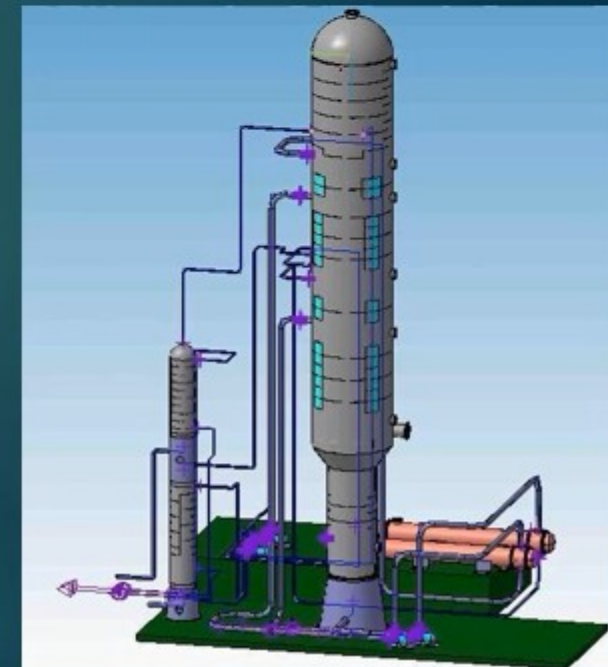
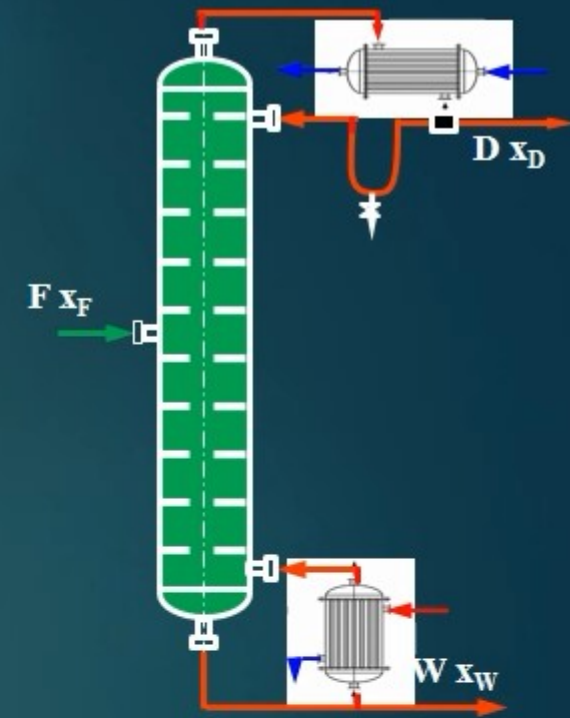
Nhập liệu: n cấu tử tại đĩa f

Để tách hỗn hợp n cấu tử có 2 phương án:

- Dùng $n - 1$ tháp chưng đơn giản \rightarrow tìm phương pháp bố trí tháp tối ưu
- Dùng 1 tháp phức tạp, có $n - 2$ điểm tách ở thân tháp \rightarrow tìm điểm tách

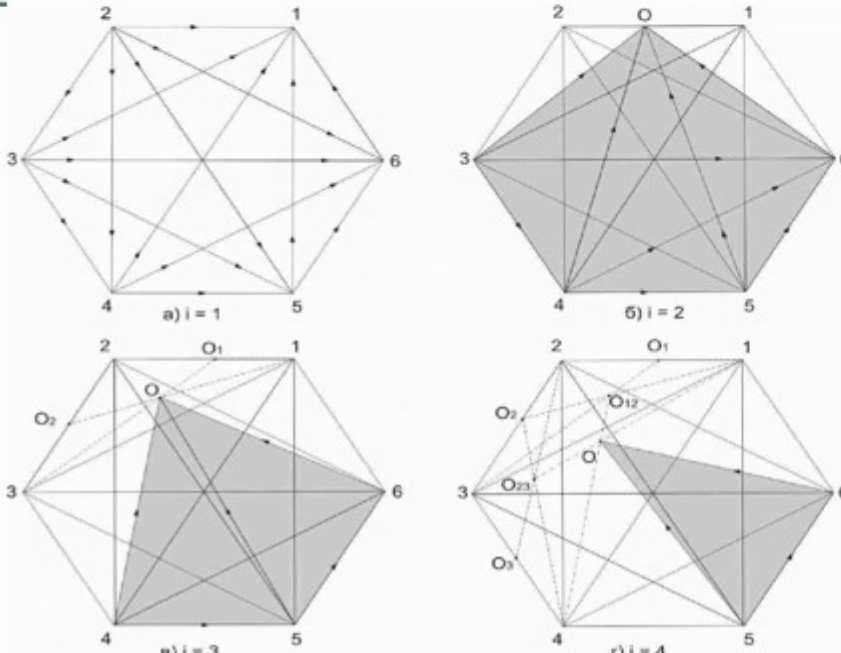
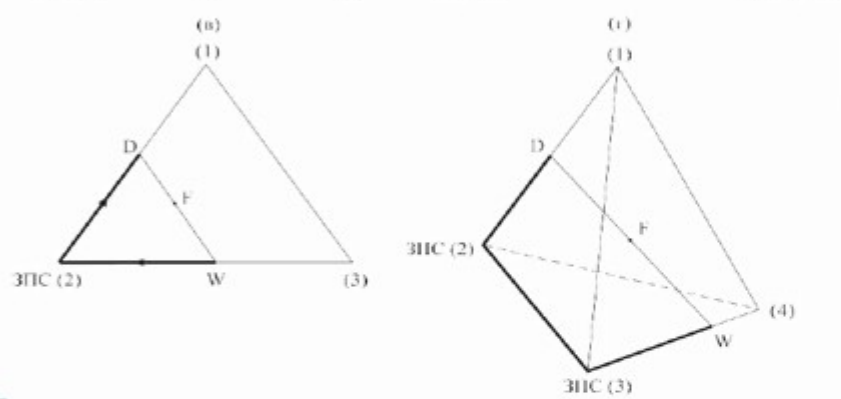
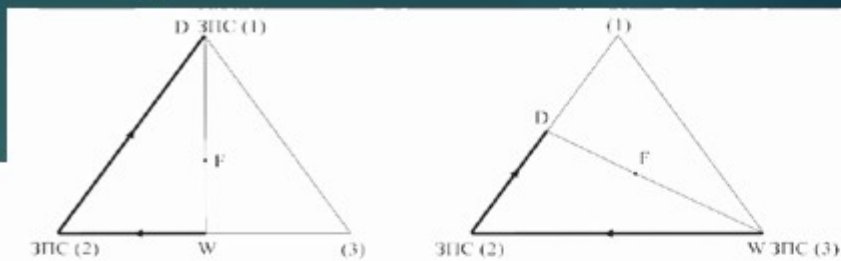
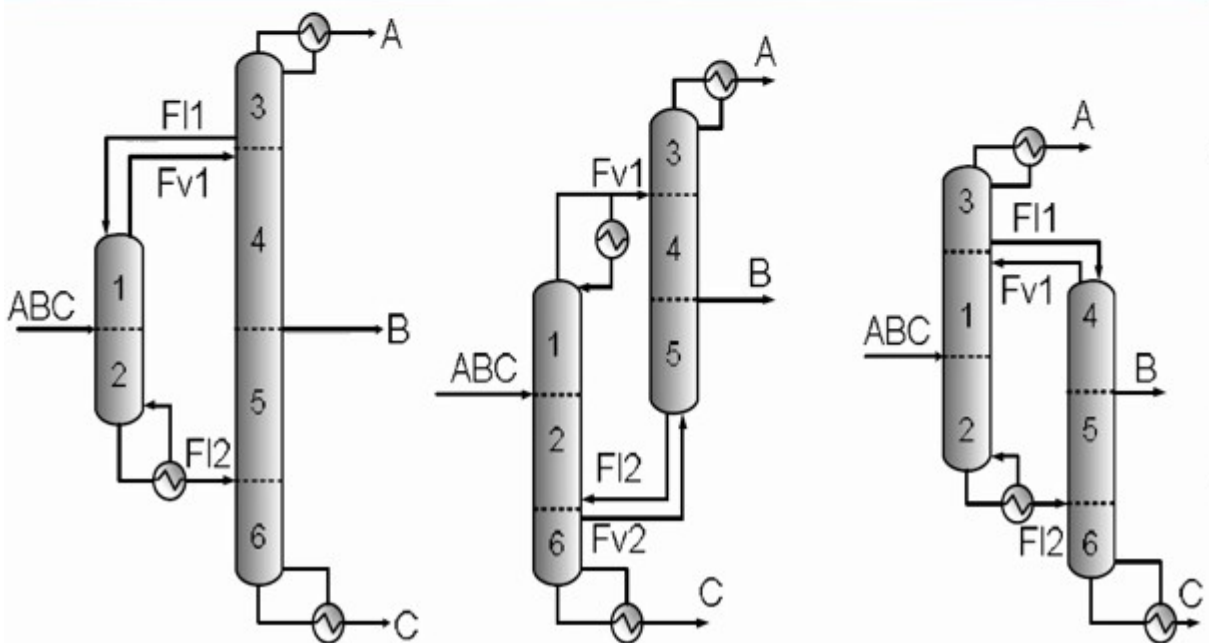
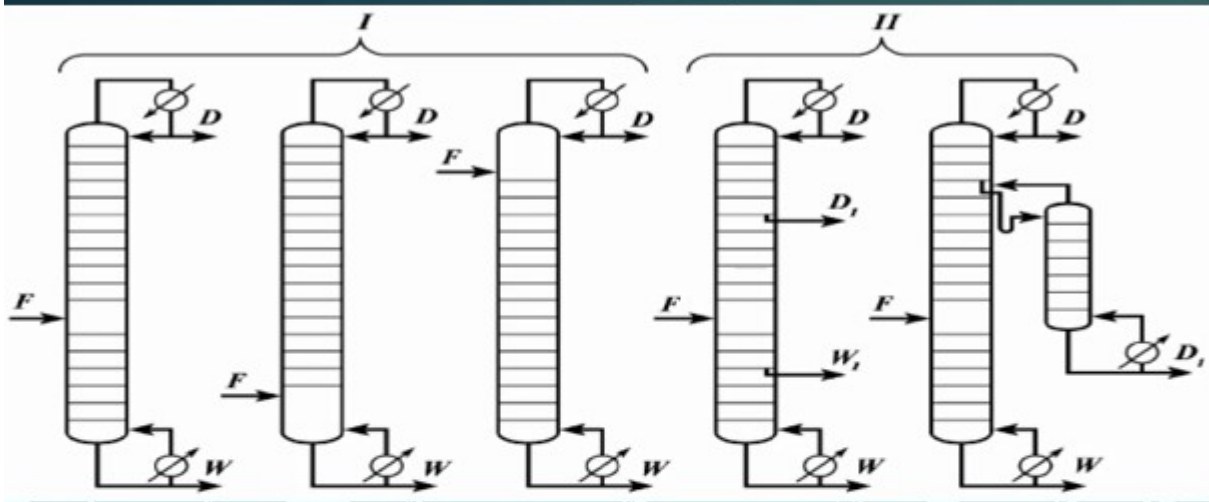
4.1 Chưng bằng $n - 1$ tháp chưng đơn giản: $F \rightarrow D + W$

Số phương án: $N = \frac{[2(n-1)]!}{n!(n-1)!}$



4) Mô hình hóa quá trình và thiết bị chưng cất

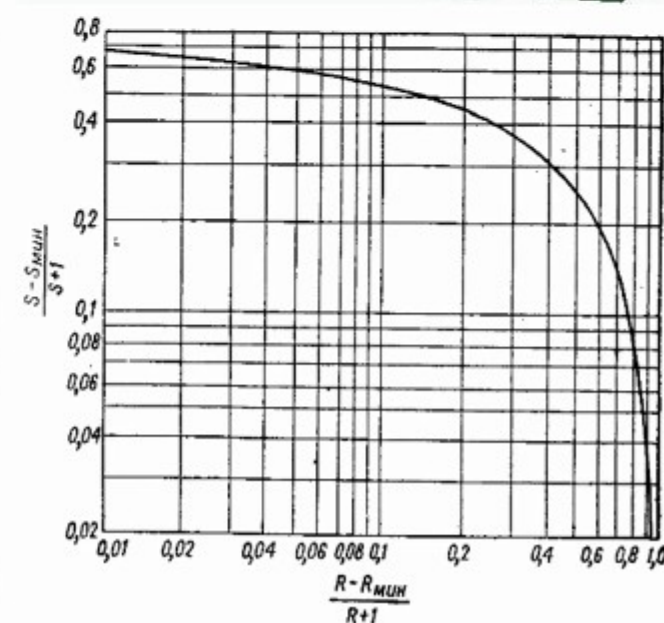
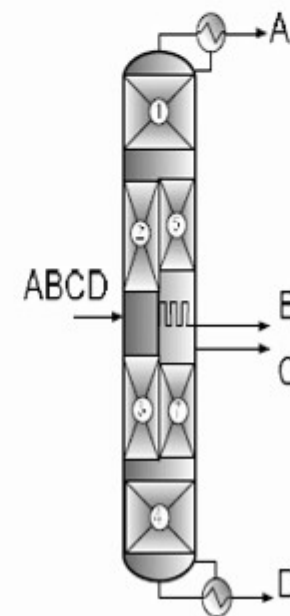
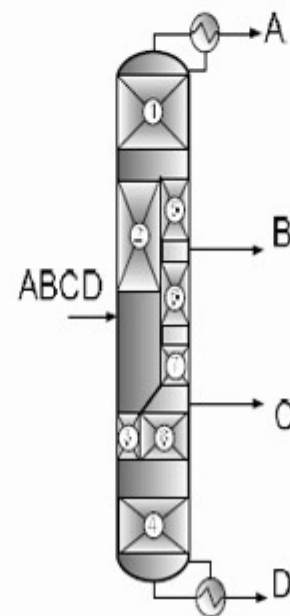
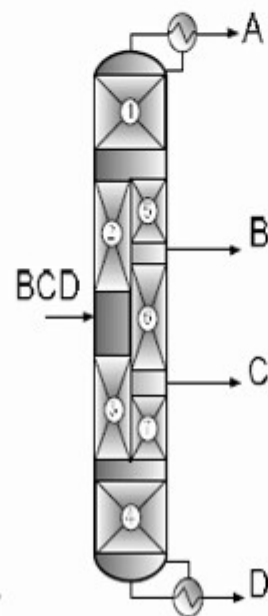
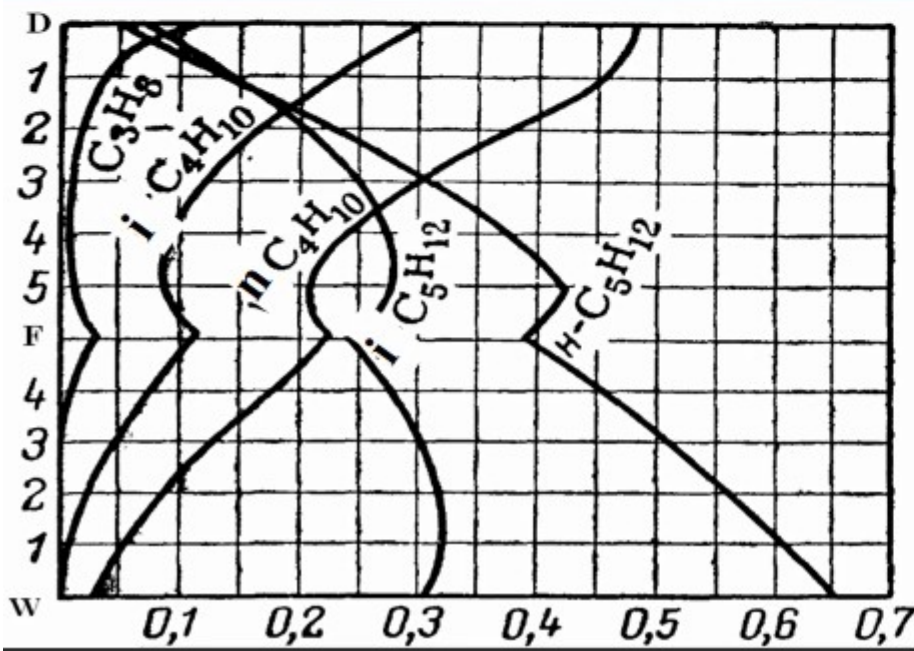
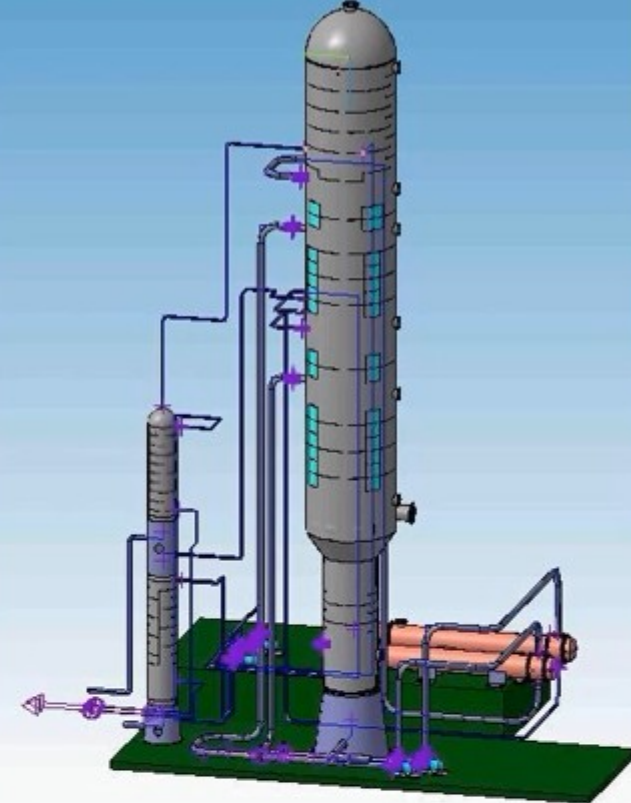
Số phương án: $N = \frac{[2(n-1)]!}{n!(n-1)!}$



n	$N = \frac{[2(n-1)]!}{n!(n-1)!}$
2	1
3	2
4	5
5	14
6	42
7	132
8	429
9	1430
10	4862

4) Mô hình hóa quá trình và thiết bị chưng cất

- Số đĩa lý thuyết cực tiểu: $N_{min} = \frac{\lg\left(\frac{x_{iD}x_{jW}}{x_{iW}x_{jD}}\right)}{\lg\left(\frac{\alpha_i}{\alpha_j}\right)}$
- Đĩa nhập liệu: $\frac{N_1}{N_2} = \left[\frac{W}{D} \left(\frac{x_{iF}x_{kW}}{x_{iD}x_{kF}} \right) \right]$
- Số hồi lưu cực tiểu: $R_{min} = \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_{i/v}x_D}{\alpha_{i/v} - \omega}$
- Số đĩa thực: $N = 1,7N_{min} + 0,7$
- Chỉ số hồi lưu: $R = 1,35R_{min} + 0,35$



4) Mô hình hóa quá trình và thiết bị chưng cất

Lập cân bằng vật chất với: thiết bị ngưng tụ hồi lưu

đĩa bất kỳ đoạn cất

đĩa nhập liệu

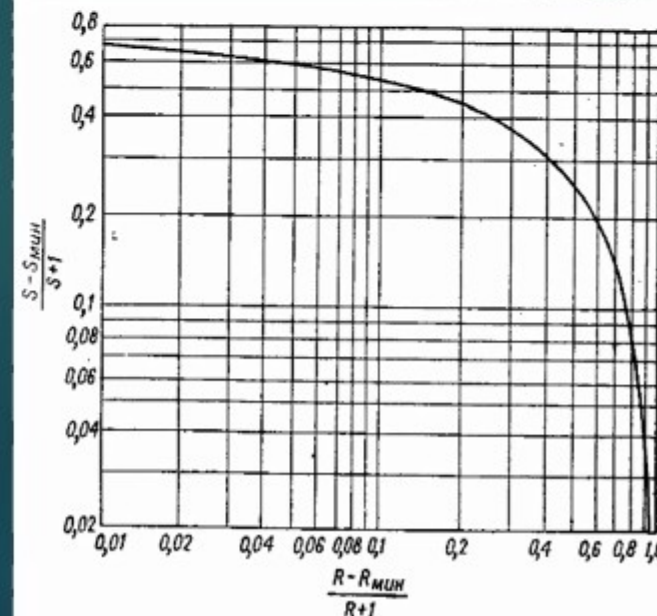
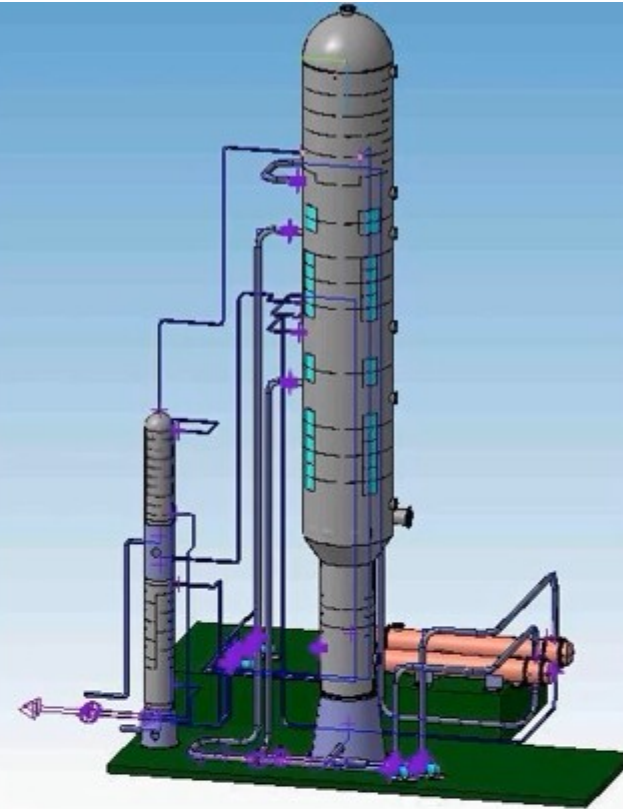
đĩa bất kỳ của đoạn chưng

thiết bị đun sôi đáy tháp

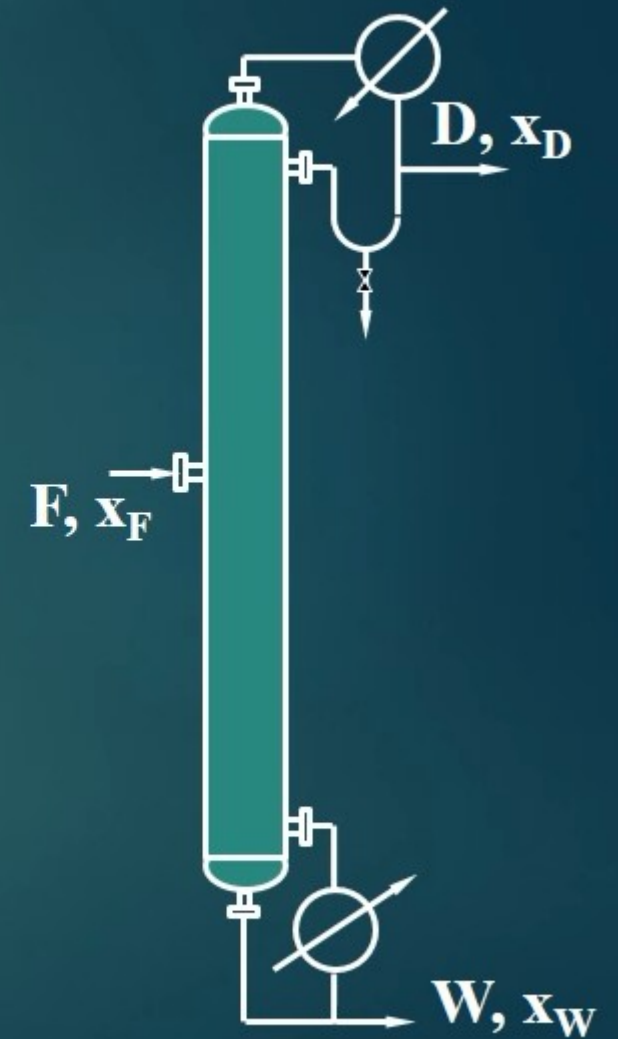
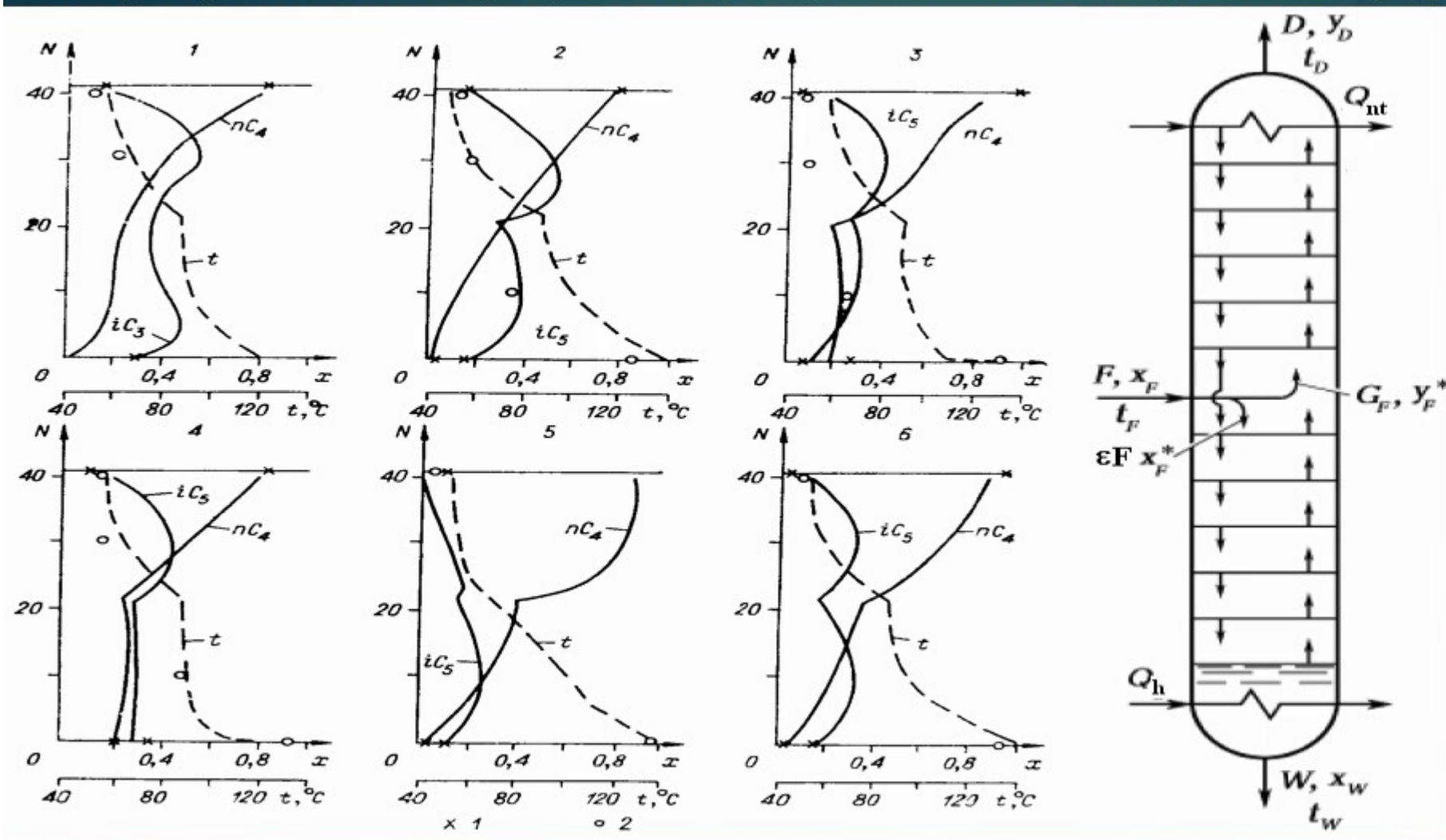
Hệ có $(n + 2)(k + 1)$ phương trình: n đĩa, k cấu tử

Giải hệ phương trình theo phương án tính dần từng đĩa:

- Đoạn cất bắt đầu từ thiết bị ngưng tụ $\rightarrow f$
- Đoạn chưng từ nồi đun đáy tháp $\rightarrow f$
- Biết thành phần nhập liệu, sản phẩm đỉnh và đáy \rightarrow tính nồng độ các cấu tử trên đĩa:



Kết quả phân bố nồng độ và nhiệt độ sôi trên các (40) đĩa có dạng



Từ kết quả này xác định vị trí tách sản phẩm có nồng độ lớn

Cường hóa quá trình truyền khối

