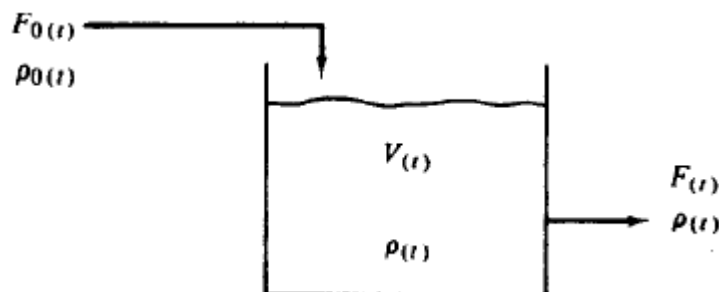


BÀI TẬP MÔ HÌNH HÓA

PHẦN MỘT : PHƯƠNG TRÌNH LIÊN TỤC TOÀN BỘ

Bài tập 1. Xét một thùng chứa chất lỏng được khuấy (lý tưởng) như trong hình sau :



Hình 1. Thùng khuấy lý tưởng

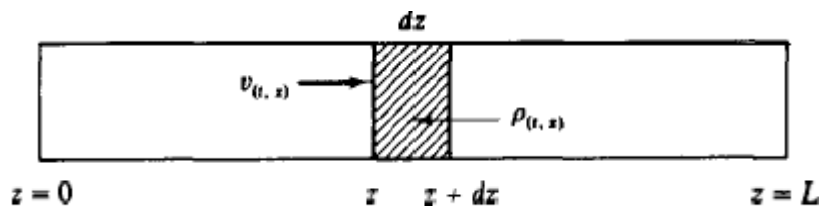
Chất lỏng được cung cấp vào bình với lưu lượng thể tích F_0 (m^3/min) và mật độ ρ_0 (kg/m^3).

Thể tích chiếm chỗ của chất lỏng trong bình là $V(m^3)$ và mật độ của nó là ρ . Lưu lượng dòng ra khỏi thùng là F và mật độ của nó là bằng với mật độ của chất lỏng trong thùng (do được khuấy lý tưởng).

Viết phương trình liên tục toàn bộ (cân bằng khối lượng) cho lượng chất lỏng chứa trong thùng ?

Giả sử $F_0 = F = \text{const}$, $\rho_0 = \text{const}$ và $V = \text{const}$. Tìm biểu thức của sự thay đổi mật độ. Biểu diễn dạng điệu của nghiệm ? Xác nhận với Matlab ?

Bài tập 2. Lưu chất chảy xuyên qua một ống dạng xi-lanh đường kính không đổi như hình sau :



Hình 2. Dòng chảy qua một ống

Hai biến không gian z và thời gian t là độc lập. Dòng chảy giả sử một chiều (không có GRADIENT theo phương bán kính cho vận tốc và khối lượng riêng). Khối lượng riêng và vận tốc có thể thay đổi khi chất lỏng chảy theo dọc trục z : $\rho(z, t)$ và $v(z, t)$.

Áp dụng phương trình liên tục toàn bộ cho phân tố giữa z và $z+dz$, hãy rút ra mô hình toán học cho hệ đang khảo sát? Giả sử $v(z, t) = \text{const}$, xấp xỉ phương trình nhận được dùng

phương pháp sai phân hữu hạn $\left. \frac{d\rho(z, t)}{dz} \right|_{z=z_i} = \frac{\rho(z_i, t) - \rho(z_{i-1}, t)}{z_i - z_{i-1}}$ với N điểm rời rạc? Tìm

nghiệm xấp xỉ với Matlab với các giá trị số sau với $L=1$ (m), $v=0.02$ (m/min), số điểm rời rạc N tự chọn. Các điều kiện ban đầu và biên giả sử là :

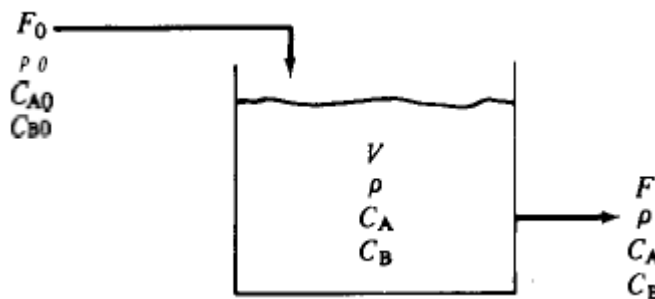
$$\begin{cases} \rho(z, t = 0) = 1 - \frac{z}{L} \\ \rho(z = 0, t) = 1 \end{cases} \quad \text{hoặc} \quad \begin{cases} \rho(z, t = 0) = 1 - \frac{z}{L} \\ \rho(z = 0, t) = 1 - \exp(-t) \sin(t) \end{cases}$$

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

PHẦN HAI : PHƯƠNG TRÌNH LIÊN TỤC CHO TỪNG CẦU TỬ

Bài tập 3. Xét lại hệ thùng khuấy lý tưởng như Hình 1. Giả sử rằng có một phản ứng hóa học pha lỏng trong thùng. Hệ được mô hình với trường hợp khuấy lý tưởng như hình sau :



Hình 3. CSTR

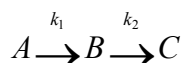
Cầu tử A phản ứng bất thuận nghịch ở hằng số động học k để tạo thành sản phẩm, cầu tử B.



Kí hiệu nồng độ của cầu tử A trong dòng cung cấp đầu vào là C_{A0} và trong bình phản ứng là C_A (tương tự cho cầu tử B). Giả sử phản ứng là bậc 1, tốc độ tiêu thụ của chất phản ứng A trong một đơn vị thể tích sẽ là tỉ lệ đến nồng độ của A trong bình phản ứng theo quan hệ tác động khối lượng.

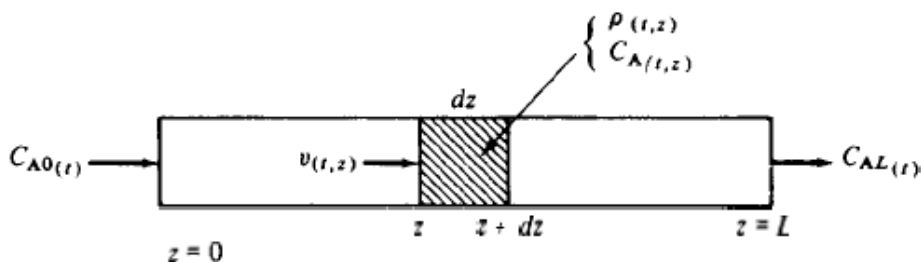
Viết các phương trình cân bằng vật chất cho từng cầu tử A và B ? Tính giá trị trạng thái hoạt động dừng của hệ thống ? Tự chọn các giá trị số và mô phỏng với máy tính động học của hệ.

Bài tập 4. Xét lại hệ thống của bài tập 3. Giả sử rằng các phản ứng nối tiếp nhau được xem xét. Chất phản ứng A tạo ra B với hằng số động học k_1 và B có thể phản ứng với hằng số động học k_2 để tạo thành cầu tử thứ ba C.



Giả sử các phản ứng này là bậc 1. Vận tốc phản ứng được mô tả bởi luật tác động khối lượng. Viết phương trình liên tục cho từng cầu tử. Rút ra mô hình toán học ?

Bài tập 5. Xét lại trường hợp chất lỏng chảy qua ống như trường hợp bài tập 2 với phản ứng hóa học bậc một $A \rightarrow B$. Khi đơn vị vật chất di chuyển dọc theo chiều dài của bình phản ứng, nồng độ của chất phản ứng A giảm vì A bị tiêu thụ. Mật độ ρ , vận tốc v và nồng độ C_A có thể thay đổi theo thời gian t và vị trí z . Bỏ qua sự thay đổi của các đại lượng này theo phương bán kính.



Hình phản ứng ống

Viết phương trình toán học mô tả sự thay đổi nồng độ của cấu tử A .

Hint: Sử dụng phương trình cân bằng vật chất cho cấu tử A và định luật Fick.

cuu duong than cong . com

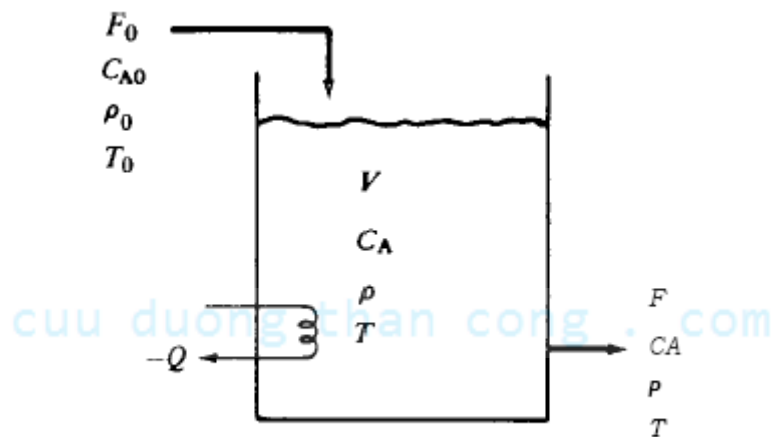
cuu duong than cong . com

PHẦN BA : PHƯƠNG TRÌNH NĂNG LƯỢNG

Bài tập 6. Hệ bình phản ứng khuấy lý tưởng liên tục của bài tập 3 sẽ được xem xét với một thiết bị làm lạnh bên trong bình phản ứng để loại bỏ nhiệt của phản ứng tỏa nhiệt λ (cal/g/mol của A được tạo ra). Chúng ta sử dụng quy ước quen thuộc rằng λ là âm cho các phản ứng phát nhiệt và dương cho các phản ứng thu nhiệt. Tốc độ tạo nhiệt (năng lượng trong một đơn vị thời gian) do phản ứng hóa học xảy ra được định nghĩa như là tích của tốc độ bị tiêu thụ của chất phản ứng A với λ

$$Q_G = -\lambda V C_A k$$

Tốc độ loại bỏ nhiệt từ khối lượng phản ứng đến thiết bị làm lạnh là $-Q$ (năng lượng trong một đơn vị thời gian). Nhiệt độ của dòng cung cấp là T_0 và trong bình phản ứng là T (K hay $^{\circ}\text{C}$).



Hình CSTR với trao đổi nhiệt

Viết phương trình cân bằng năng lượng cho hệ ?

cuu duong than cong . com