# استفاده از روش Invariant - Imbedding در حل مسائل Unit operation

ترجمه :
فیروز رسولی
سال پنجم مهندسی شیمی دانشکده فنی

وقتی شرایط اولیه معادلات دیفرانسیل بطور کامل در دست باشد حسابگرهای مدرن وسیله بسیار موثری برای حل آنها میباشند. منتهی بسیاری از مسائل مهندسی شیمی مسائل حدی (boundary-value problem) میباشند که شرایط در یک نقطه بطور کامل در دست نمیباشد. مسائلی از این نوع بسیار مشکل بوده و برای حسابگرهای رقمی (digital computer) مناسب نمیباشد. اخیراً طرق گوناگونی برای تبدیل مسائل حدی به‌شکلی که برای‌شمارگرهای رقمی (digital computer) مناسب باشد ارائه شده است. این طرق رامیتوان بدو دسته تقسیم نمود. دسته‌اول طرق کلاسیک میباشد که بین آنها جالبتر از همه طریقه نیمه خطی کردن - (quasilinearization) میباشد در دسته دوم ازاصل (Invariant Imbedding) استفاده میشود که از متد کلاسیک کاملاً متفاوت میباشد. بجای درنظر گرفتن یک‌مسئله‌منفرد بامقدار مشخصی برای‌متغییرمستقل یک دسته مسائل با متغییری از صفر تا مقدار متغیر مسئله اصلی مورد توجه قرار میگیرد. با ادغام این دسته از مسائل شرایط مورد نظر برای مسئله حدی دونقطه‌ای بدست می‌آید.

## روش Invariant Imbedding

منشأ روش (Invariant-Imbedding) مربوط بتئوری نیمه گروهها (Semigroup) است و Ambarzumian از جمله اولین کسانی بوده که این اصل را بطور وسیع مورد استفاده قرار داده است Chandrasekhar نتایج تحقیقات Ambarzumian را عمومیت دادن وازآن در تئوری انتقال تابشی استفاده نمود.

از روش Imbedding میتوان در بسیاری از مسائل مختلف استفاده نمود. دراین مقاله این روش معرفی میشود وکاربردهای استثنائی آن در مسائل مهندسی شیمی مورد بحث قرار میگیرد. البته دراینجا تاکید بیشتر برروی جنبه محاسباتی این طریقه میباشد و جنبه تئوری وکاربردهای تحلیلی آن مورد بررسی

قرار نمیگیرد . برای بررسی آن یک‌مسئله ساده حدی را مورد توجه قرار میدهیم و بعنوان مثال عددی شرط اولیه نامعلوم را برای یک راکتور لوله‌ای بدست می‌آوریم. چنانکه بعداً خواهیم دید بکار بردن این طریقه برای حل‌عددی (numerical) مسئله‌بسیار وقت‌گیر میباشدمعمولاً حل مسائل از طریق‌دیگر صورت‌میگیرد ولی بهرحال حل عددی از این‌جهت که بطور واضح پدیده (Imbedding) را نشان سیدهد قابل توجه‌است.

برای تشریح پدیده (Invariant-Imbedding) یک مسئله مرزی (boundary-value) دو نقطه‌ای غیر خطی :

$$\frac{dx}{dt}=f(x,y,t)$$

$$\frac{dy}{dt}=g(x,y,t) \qquad (۱)$$

را باشرایط مرزی زیر $x(۰)=c$ درنظر میگیریم :

$$y(t_f)=۰$$

$$۰\leqslant t\leqslant t_f \qquad (۲)$$

برای حل مساله مرزی دونقطه‌ای فوق آن را بیک مساله با مقدار اولیه (Initial-Value) تبدیل میکنیم به‌عبارت دیگر شرط اولیه نامعلوم $y(۰)$ را بکمک پدیده (Invariant Imbedding) بدست میآوریم‌بدین منظور ابتدا شرط‌مرزی کلی‌تری رادرنظر می گیریم.

$$x(a)=c$$

$$y(t_f)=۰ \qquad (۳)$$

$$a\leqslant t\leqslant t_f$$

(a) مقدار ابتدائی متغیر مستقل(t) بوده و زمان انجام تحول را هم کنترل مینماید . اگر (a) مقادیری بین صفر تا $t_f$ $(a=۰,\Delta,۲\Delta,\cdots\cdots)$ اختیار نماید یک‌دسته مسئله با مقادیر ابتدائی مختلف حاصل میشود که همگی بوسیله معادلات ۱ و ۳ بیان میشوند. حال ببینیم چگونه میتوان شرایط اولیه مجهول $y(a)$ را برای این‌دسته از مسائل بدست‌آورد. برای این‌کار از ارتباط تحولات مجاور و نزدیک هم استفاده میکنیم . البته شرط اولیه $y(a)$ برای این‌دسته از تحولات فقط تابع نقطه شروع تحول (a) نبوده بلکه به‌حالت اولیه یا شرط اولیه (c) هم‌بستگی دارد.

$r(c,a)$=شرط اولیه نامعلوم سیستمی است که با معادلات ۱ و ۳ بیان شده و درابتدای امر که $t=a$ بوده مقدار $x(a)=c$ بوده است.

بنابراین :

$$y(a)=r(c,a) \quad (٤)$$

بافرض r بعنوان متغیر وابسته و c و a بعنوان متغیرهای مستقل عبارتی برحسب a و c بدست میآید. باتوجه به‌اینکه مقدار اولیه تحول مجاور $a+\Delta$ است میتوان شرط اولیه نامعلوم دو تحول را بوسیله سری تیلور بهم ارتباط داد.

$$y(a+\Delta)=y(a)+y'(a)\Delta+o(\Delta) \quad (٥)$$

که در رابطه فوق $o(\Delta)$ نماینده تمام جملاتی‌است که درآنها توان $(\Delta)$ از یک بیشتر است.

از طرفی مقدار معادله ۱ در نقطه ابتدائی (a) عبارتست از:

$$x'(a)=f[x(a),y(a),a]=f[c,r(c,a),a] \quad (٦a)$$

$$y'(a)=g[x(a),y(a),a]=g[c,r(c,a),a] \quad (٦b)$$

با قرار دادن معادلات (٦b) و (٤) در معادله (٥) داریم :

$$y(a+\Delta)=r(c,a)+g[c,r(c,a),a]\Delta+o(\Delta) \quad (٧)$$

از طرف دیگر عبارت زیر از رابطه (٤) بدست میآید:

$$y(a+\Delta)=r[x(a+\Delta),a+\Delta] \quad (٨)$$

همچنین میتوان عبارت $x(a+\Delta)$ را باسری تیلور به‌تحول مجاور آن $x(a)=c$ مربوط نمود

$$x(a+\Delta)=x(a)+x'(a)\Delta+o(\Delta)=c+f[c,r(c,a),a]\Delta+o(\Delta) \quad (٩)$$

بنابراین رابطه (٨) بصورت زیر درمیآید :

$$y(a+\Delta)=r\{c+f[c,r(c,a),a]\Delta+o(\Delta),a+\Delta\} \quad (١٠)$$

طرفین معادلات ٧ و ١٠ را مساوی‌یکدیگر قرار میدهیم از جملاتی که درآنها توان $(\Delta)$ بزرگتر از یک‌است صرفنظر میکنیم .

$$r(c,a)+g[c,r(c,a),a]\Delta=r\{c+f[c,r(c,a),a]\Delta,a+\Delta\} \quad (١١)$$

شرط اولیه مطلوب از حل‌معادله تفاضلی (١١) حاصل میگردد از طرفی اگرطرف راست معادله(١١) رابوسیله سری تیلوز بسط دهیم :

(١٢)

$$r\{c+f[c,r(c,a),a]\Delta,a+\Delta\}=r(c,a)+f[c,r(c,a),a]\Delta\frac{\partial r(c,a)}{\partial c}+\Delta\frac{\partial r(c,a)}{\partial a}+o(\Delta)$$

درحد وقتی $\Delta$ بسمت صفر میل میکند معـادله مشتق نسبی نیمه خطی زیر از معادله (۱۱) و (۱۲) بدست میآید .

$$f[c,r(c,a),a]\frac{\partial r(c,a)}{\partial c}+\frac{\partial r(c,a)}{\partial a}=g[c,r(c,a),a] \tag{۱۳}$$

برای بدست آوردن‌شرط مرزی چنین استدلال میکنیم که اگر زمان انجام‌تحول‌بصفر میرسید . شرط اولیه‌مطلوب مساوی با شرائط انتهائی‌معلوم میگردید .

$$r(c,t_f)=\cdot \tag{۱٤}$$

در رابطه فوق (c) میتواند تمام مقادیر $x(t)$ را اختیار نماید .

$r(c,a)$ برای دسته تحولاتی که دارای مقادیر ابتدائی a بین صفر و $t_f$ میباشند از حل معادله‌(۱۱) یادستگاه معادلات (۱۳) و (۱٤) بدست میآید .

**مثال عددی**

برای حل معادله (۱۳) که یک معادله مشتق نسبی میباشد طرق گونا گونی وجود دارد . ولی‌برای تشریح پدیده (Invariant Imbedding) بجای حل معادله مشتق نسبی معادله تفاضلی ـ (difference equation) (۱۱) را حل خواهیم کرد .

حل معادله تفاضلی بوضوح این پدیده را توجیه مینماید . واکنش شیمیائی ساده زیر را که دریک راکتور لوله‌ای (tubular) که‌بطور محوری (axial) مخلوط میشود درنظر میگیریم :

$$A+A \longrightarrow B \tag{۱۰}$$

از روی بیلان مواد برحسب A معادله زیر بدست میآید :

$$\frac{۱}{N_{pe}}\frac{d^۲x}{dt^۲}-\frac{dx}{dt}-Rx^۲=\cdot \tag{۱٦}$$

که شرایط حدی آن عبارت است‌از :

$$x_e=x(\cdot)-\frac{۱}{N_{pe}}\frac{dx(\cdot)}{dt} \qquad t=\cdot \quad \text{در} \tag{۱۷}$$

$$\frac{dx(۱)}{dt}=\cdot \qquad t=۱ \quad \text{در} \tag{۱۸}$$

کـه در آن $N_{pe}$ گروه (Peclet) ، R شدت واکنش ، x غلظت جسم A ، t گروه بدون بعد اندازه راکتور میباشد که بین . و ۱ تغییر میکند .

$x_e$ غلظت A را قبل از ورود به‌راکتور نشان میدهد. معادله ۱۶ را میتوان بصورت زیر نوشت .

$$\frac{dx}{dt}=y$$

$$\frac{dy}{dt}=N_{pe}y+N_{pe}Rx^{۲} \qquad (۱۹)$$

و بجای استفاده از شرایط مرزی اصلی ، شرایط مرزی ساده‌تری را بکار میبریم .

$$۰\leqslant t\leqslant ۱$$

$$x(۰)=۱$$

$$y(۱)=۰ \qquad (۲۰)$$

چنانکه‌بعدا خواهیم دیدا گر دامنه‌ای‌که برای $x(۰)$ بکار برده‌ایم‌باندازه کافی‌بزرگ باشد حل معادله(۱۱) برای سیستم معادلات (۱۹) و (۲۰) هم‌همان شرایط حدی اصلی را که بوسیله معادلات (۱۷) و (۱۸)بیان شده بدست میدهد. برای حل این مسئله بجای درنظرگرفتن یک مساله مرزی (boundary-value) فوق یک دسته مسائل باشرایط مرزی زیر درنظر میگیریم :

$$x(a)=c$$

$$y(۱)=۰ \qquad (۲۱)$$

$$a\leqslant t\leqslant ۱$$

وباتوجه به‌نامگذاری قبلی معادله (۱۱) را برای حل سیستم معادلات (۱۹) و (۲۰) بکار میبریم :

$$\begin{cases} f(x,y,t)=y \\ g(x,y,t)=N_{pe}y+N_{pe}Rx^{۲} \end{cases}$$

$$t_f=۱$$

درنتیجه خواهیم داشت :

$$r(c,a)+N_{pe}r(c,a)+N_{pe}Rc^{۲}\Delta=r[c+r(c,a)\Delta,a+\Delta] \qquad (۲۲)$$

اگر معادله (۲۲) را برحسب$r(c,a)$ حل کنیم :

$$r(c,a)=\frac{۱}{۱+N_{pe}\Delta}\{r(c+r(c,a)\Delta\ ,\ a+\Delta]-N_{pe}Rc^{۲}\Delta\} \qquad (۲۳)$$

اگر مقدار $\Delta$ کوچک باشد تقریب زیر جایز است:

$$r[c+r(c,a),a+\Delta]=r[c+r(c,a+\Delta)\Delta,a+\Delta] \qquad (۲۴)$$

پس معادله (۲۳) را میتوان بصورت زیر نوشت :

$$r(c,a)=\frac{۱}{۱+N_{pe}\Delta}\{r[c+r(c,a+\Delta)\Delta, a+\Delta]-N_{pe}Rc^{۲}\Delta\} \qquad (۲۵)$$

که شرایط انتهائی عبارت است از :

$$r(c,t_f)=r(c,۱)=y(۱)=۰ \qquad ۰\leqslant c\leqslant c \qquad (۲۶)$$

معادله (۲۵) را میتوان بطریق پسروبرگشتی (backward-recursive) حل نمود. حل مساله را از شرط انتهائی یعنی معادله (۲۶) درنقطه $a+\Delta=t_f$ شروع میکنیم. چون نمیتوان‌مقدار r را برحسب تمام‌مقادیر c بدست آورد. باین‌جهت برای c مقادیر مشخص و غیر پیوسته‌ای فرض میکنیم :

$$c=۰,\delta,۲\delta,\cdots\cdot \qquad (۲۷)$$

و مقدار r را برای مقادیر اختیاری فوق بدست میآوریم سپس دو محور عمود برهم‌اختیار کرده محور عمودی را به $\left(\frac{c}{\delta}\right)$قسمت و محور افقی رابه $\left(\frac{t_f}{\Delta}\right)$ قسمت تقسیم میکنیم و بـاین‌ترتیب یک شبکه در روی صفحهٔ بوجود میآوریم. برای درك بهتر مقادیر عددی زیر را درنظر میگیریم .

$$R=۲\ ,\ N_{pe}=۶,\Delta=۰/۱\ ,\ s=۰/۱ \qquad (۲۸)$$

درنقطه انتهائی $a=t_f=۱$ و مقدار r برای تمام مقادیر c در دست است. در مسئله‌فوق این مقدار ثابت‌بوده وبرابر صفر است. حال مقدار $r(c,۱-\Delta)$ را بدست میآوریم یعنی مقدار r درنقطه $a=۱-\Delta$ . اگر مقدار $a=۱-\Delta$ را در معادلـه (۲۵) قرار دهیم خواهیم داشت :

$$r(c,۱-\Delta)=\frac{۱}{۱+N_{pe}\Delta}\{r[c+r(c,۱)\Delta,۱]-N_{pe}Rc^{۲}\Delta\} \qquad (۲۹)$$

چون :

$$r(c,۱)=r[c+r(c,۱)\Delta,۱]=۰$$

پس :

$$r(c,۱-\Delta)=\frac{۱}{۱+N_{pe}\Delta}[-N_{pe}Rc^{۲}\Delta] \qquad (۳۰)$$

با قرار دادن $c=۰,s,۲s$ درمعادله (۳۰) مقدار r در $a=۱-\Delta$ بدست میآید . نتایج درجدول ۱ نشان داده شده است. بادر دست داشتن مقادیر r درنقطه $a=۱-\Delta$ میتوان مقادیر r درنقطهٔ $a=۱-۲\Delta$ را بدست آورد. اگر مقدار $a=۱-۲\Delta$ را درمعادله (۲۵) قرار دهیم داریم :

$$r(c,1-2\Delta)=\frac{1}{1+N_{pe}\Delta}\{r[c+r(c,1-\Delta)\Delta,1-\Delta]-N_{pe}Rc^2\Delta\} \quad (31)$$

چون مقادیر $r$ در $a=1-\Delta$ روی جدول ۱ در دست میباشد پس‌طرف راست معادله (۳۱) کاملاً معلوم است. برای $c=0.01$ از تابلو (۱) داریم:

$$\begin{aligned} &r(0.01\,,\,1-\Delta)=-0.0075 \\ &r[0.01+r(0.01\,,\,1-\Delta)\Delta\,,\,1-\Delta]=r(0.009925\,,\,1-\Delta) \end{aligned} \quad (32)$$

مقدار $r$ در معادله (۳۲) را میتوان از جدول باانترپلاسیون خطی بدست آورد. وقتی مقدار $r$ از معادله (۳۲) بدست‌آمدمیتوان‌مقدار $r(0.01\,,\,1-2\Delta)$ را از معادله (۳۲) بدست‌آورد. بهمین ترتیب‌میتوان $r(c,1-2\Delta)$ را برای مقادیر ۰۰۰۰ و ۰٫۰۳ و ۰٫۰۲ $=c$ بدست آورد.

جدول (۲) برای بدست آوردن مقادیر $r(c,1-3\Delta)$ دوبرتبه از معادله (۲۵) استفاده میکنیم:

$$r(c,1-3\Delta) = \frac{1}{1+N_{pe}\Delta}\{r[c+r(c,1-2\Delta)\Delta,1-2\Delta]-N_{pe}Rc^2\Delta\} \quad (33)$$

معادله (۳۳) را میتوان بهمان ترتیبی که برای معادله (۳۱) ذکر شد حل نمود. یعنی با استفاده از جدول (۲) بکمک انترپلاسیون خطی. این‌طریق را میتوان آنقدر ادامه‌داد تا مقدار $r(c,0)$ بدست باید توجه داشت که در محاسبه $r(c,1-k\Delta)$ فقط مقادیر $r[c,1-(k-1)\Delta]$ مورد لزوم است.

جدول های‌مشابه(۱) و (۲) برای‌هر $r(c,1-k\Delta)$ بازاء ۱۰ و ۰۰۰ و ۲ و ۱ $=k$ بدست میآوریم. این تابلوها تمام مقادیر شبکه c و a را میپوشانند. آخرین جدول مربوط به $r(c,0)$ است که در جدول۳نشان داده شده حل معادله (۲۵) نه‌تنها شرط اولیه مطلوب را برای سیستم اصلی که با معادلات (۱۹) و (۲۰) نشان داده شده بما میدهد. بلکه شرایط اولیه تمام مسائلی راکه شرایط مرزی آنان با معادله(۲۱) باتوجه بفرایض $0 \leqslant a \leqslant t_f$ و $0 \leqslant c \leqslant c$ بیان شده بدست میدهد. چون شرایط اولیه برای تمام مقادیر مناسب c و a بدست آمده بنابراین میتوانیم شرط اولیه نامعلوم مثال عددی راکه شرایط مرزی آن با معادلات(۱۷) و (۱۸) بیان شده بدست بیاوریم. معادلات (۱۷) و (۱۸) را بصورت زیر مینویسیم:

$$x_e=x(0)-\frac{y(0)}{N_{pe}} \quad (34-a)$$

$$y(1)=0 \quad (34-b)$$

که در رابطه فوق $x_e=1$ است درحقیقت از جدول ۳ مقادیری برای c و $r(c,0)$ اختیار میکنیم که طرف راست معادله $34-a$ برابر ۱ شود.

$x(0)=c=0.8 \qquad x_e=0.8-\frac{-0.952587}{6}=0.95876$

$x(0)=0.9 \qquad x_e=0.9-\frac{-1.1788}{6}=1.09645$

باعلم باینکه :

$y(0)=r(c,0)$

باانترپلاسیون خطی مقدار متناظر $x_e=1$ را بدست میآوریم $x(0)=0.8309$ درنتیجه :

$x(0)=0.82990 \qquad y(0)=-1.01458$

مقادیر واقعی که بطریق دیگر محاسبه شده عبارت است از :

$x(0)=0.83129 \qquad y(0)=-1.0122$

برای اینکه دقت جواب بدست آمده بیشتر شود لازم است مقدار $\Delta$ و s خیلی کوچک باشد .

برنامه شماره ۱ که بزبان فرترن IV نوشته شده برای حل مساله راکتور لوله‌ای مورد استفاده قرار گرفته . دراینجا نیز چنانکه درمقاله توضیح داده‌شده با دردست داشتن مقادیر $r(c,1)$ وبا استفاده از معادله ۲۹ مقادیر $r(c,1-\Delta)$ را بدست میآوریم . سپس بااستفاده از انترپلاسیون لاگرانژ مقادیر $r(c,1-2\Delta)$ را بدست میآوریم . واین عمل را آنقدر تکرار میکنیم تا مقادیر $r(c,0)$ بدست‌آید . در برنامه‌فوق مقادیر $R(I,1)$ متناظر بامقادیر $r(c,0)$ میباشند .

```
C     FIROUZ RASOUL I
C     PROGRAM USED TO SOLVE TUBULAR
C     REACTOR EXAMPLE
      DIMENSION R(11,11), X(10,10), P(10,10)
C     DEL=DELTA=0.1
C     PEC=PECLET NUMBER
C     RATE=REACTION RATE
      READ(1,991)DEL, PEC, RATE
C     LEFT, RIGHT TWO VARIABLES WITH
C     A TYPE FORMAT USED TO
C     PARENTHESES IN THE OUTPUT OF
C     PROGRAM. LEFT IS USED TO INTRODUCE
C     "R(2," AND RIGHT IS USED TO
```

```
C     INTRODUCE«)»
      READ (1,992) LEFT, RIGHT
      WRITE(3,997)
C     THE BOUNDARY CONDITION-AT THE FINAL
C     POINT R IS EQUAL TO ZERO FOR ALL
C     VALUES OF C
      DO 2 I=1,10
      R(I,11)=0.
    2 CONTINUE
      DO 30 M=1,10
      K=12-M
      DO 100 I=1,10
      Al=I
      A=Al/10.
C     X(I,K-1)=FIRST TERM OF THE
C     EQUATION (29)
      X(I,K-1)=A+R(I,K) * DEL
      XX=X(I,-1)
C     LAGRANGIAN INTERPOLATION
      DO 10 J=1,10
      P(I ,J)=1.
      Bl=J
      B=B1/10
      DO 10 I1=1,10
      A2=I1
      C=A2/10.
      IF(I1 -J) 9,10.9
    9 P(I ,J)=P(I ,J) * ((XX-C)/(B-C))
   10 CONTINUE
      DD=0.
```

```
      DO 20 I1=1,10
      DD=DD+P(I,I1) * R(I1,K)
   20 CONTINUE
C     EQUATION (29)
      R(I,K-1)=(DD--PEC * RATE * DEL * A * A)/(1.+PEC * DEL)
  100 CONTINUE
      IN=K-1
      WRITE (3,999)(LEFT, IN, RIGHT)
      WRITE (3,998)(I,R(I,IN), I=1,10)
   30 CONTINUE
  999 FORMAT (/50X,1HI, 12X, A4, I3, Al)
  998 FORMAT (/45X, 1H * , 2X, I3, 11X, F10.6, 2X, 1H*)
  997 FORMAT (1H1, 52X, 19HINVARIANT  IMBEDDING)
  992 FORMAT (A4,A1)
  991 FORMAT (3F6.2)
      CALL  EXIT
      END
```

## استفاده ازطریقه Imbedding درمسائل جذب گاز :

دراکثر کتابهای unit operation درمورد برج های جذب گاز مداوم با جریان عکس با معادلات (۳۵) و (۳۶) مواجه هستیم .

$$\frac{dx}{dz}=(k'_x a_i s/L)(y-y^\circ)(۱-x) \qquad (۳۵)$$

$$\frac{dy}{dz}=(k'_y a_i s/v)(y-y^\circ)(۱-y) \qquad (۳۶)$$

اگر ارتفاع برج را برابر $\lambda$ فرض کنیم نقطه $z=۰$ مربوط به بالای برج و $z=\lambda$ مربوط به انتهای برج خواهد بود . بنابراین میتوانیم جزء ملکولی فاز مایع ورودی وجزء ملکولی فاز گاز ورودی را بترتیب با $x(۰)$ و $y(\lambda)$ نشان دهیم . اگر بنا بفرض جزء ملکولی جسم قابل انتقال درگاز ورودی برابر $(\tau)$ باشد داریم :

$$y(\lambda)=\tau$$

جدول ۱

| c | $R(c,1-\Delta)$ |
|---|---|
| 0.1 | −0.007500 |
| 0.2 | −0.030000 |
| 0.3 | −0.067500 |
| 0.4 | −0.120000 |
| 0.5 | −0.187500 |
| 0.6 | −0.270000 |
| 0.7 | −0.367500 |
| 0.8 | −0.480000 |
| 0.9 | −0.607499 |
| 1.0 | −0.750000 |

جدول ۲

| c | $R(c,1-2\Delta)$ |
|---|---|
| 0.1 | −0.012117 |
| 0.2 | −0.048191 |
| 0.3 | −0.107810 |
| 0.4 | −0.190567 |
| 0.5 | −0.296063 |
| 0.6 | −0.423903 |
| 0.7 | −0.573702 |
| 0.8 | −0.745079 |
| 0.9 | −0.937656 |
| 1.0 | −1.151072 |

جدول ۳

| c | $R(c,0)$ |
|---|---|
| 0.1 | −0.018763 |
| 0.2 | −0.071679 |
| 0.3 | −0.154988 |
| 0.4 | −0.266017 |
| 0.5 | −0.402748 |
| 0.6 | −0.563585 |
| 0.7 | −0.747227 |
| 0.8 | −0.952587 |
| 0.9 | −1.178743 |
| 1.0 | −1.424889 |

باتوجه بااینکه معمولاً غلظت جسم قابل انتقال درمایع ورودی برابر صفر است داریم :

$$x(۰)=۰$$

اگر معادلات (۳۵) و (۳۶) وشرایط مرزی آنرا با دستگاه معادله (۱) و شرایط آن مقایسه کنیم خواهیم دید که مساله جذب گاز را میتوان یک مساله مرزی فرض کرد که طبق متد Imb قابل حل است .

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt}=f(x,y,t) \\ \dfrac{dy}{dt}=g(x,y,t) \\ x(a)=c \\ y(t_f)=۰ \\ y(a)=r(c,a) \end{cases} \qquad \begin{cases} \dfrac{dy}{dz}=(k'_y a_i s/v)(y-y^\circ)(۱-y)=f(x,y,t) \\ \dfrac{dx}{dy}=(k'_y a_i s/L)(y-y^\circ)(۱-x)=g(x,y,t) \\ y(\lambda)=\tau=c \\ y(۰)=۰ \\ x(\lambda)=r(\tau,\lambda) \end{cases}$$

برای حل این مساله بجای استفاده از معادله تفاضلی(۱۱)مستقیماً معادله مشتق نسبی(۱۳) را مورد استفاده قرار میدهیم درصورتی که R را مساوی $r(\tau,\lambda)$ فرض کنیم و درمعادلات (۳۵) و (۳۶) R و τ را جانشین x و y کنیم خواهیم داشت :

$$(k'_y a_i s/v)(\tau-\tau^\circ)(۱-\tau)\frac{\partial R}{\partial \tau}+\frac{\partial R}{\partial \lambda}=[k'_y a_i s/L)(\tau-\tau^\circ)(۱-R)] \qquad (۳۷)$$

درنتیجه بجای حل معادلات (۳۵) و (۳۶) با دردست داشتن مقادیر مشخص برای ارتفاع برج (λ) سعی میکنیم معادله (۳۷) را حل کنیم تا ارتباط $x(\lambda)$ را با λ و τ بدست آید. چون معادله (۳۷) درمورد هر مسئله حقیقی غیر خطی میباشد بنابراین باید آنرا بطریقه عددی حل نمود. صفحه $\tau-\lambda$ را درنظر میگیریم ویک شبکه بر روی آن ایجاد میکنیم. وهررأس آنرا باانديس خاصی مشخص میکنیم اگر k را بعنوان‌اندیس درمحور اصلی و n را اندیس درمحور عمودی فرض‌نمائیم واضح است که مقدار λ و τ درهر راس برابر با :

$$\tau_n=(n-۱)\Delta\tau \qquad و \qquad \lambda_k=(k-۱)\Delta\lambda$$

که Δτ و Δλ فواصل بین خطوط شبکه است بنابراین حل معادله (۳۷) منجر به‌تعیین مقدار R در رئوس مختلف شبکه میگردد. این مقدار R را با $R_k^n$ نشان میدهیم که (k و n اندیس های مطلوب است) مثلاً اگر بخواهیم $R_۹^۶$ را تعیین کنیم باید مقدار $U(\lambda)$ را برای مقدار :

$$\tau=۸\Delta\tau \qquad و \qquad \lambda=۵\Delta\lambda$$

حساب کنیم. بطور کلی هرنقطه بااندیس $k-n$ درمعادله(۱۳) صدق میکند یعنی :

$$\frac{\partial R}{\partial \lambda}\Big|_{k,n}+g(R_n^k, \tau_n)(\partial R/\partial \tau)\Big|_{k,n}=f(R_n^k, \tau_n)$$

اگر در معادله فوق بجای مشتقات مقدار تقریبی آنها را قرار دهیم و معادله را برحسب $R_n^{k+1}$ حل کنیم :

$$\frac{\partial R}{\partial \lambda}\Big|_{k,n}\cong(R_n^{k+1}-R_n^k)/\Delta\lambda \qquad (۳۸)$$

$$\frac{\partial R}{\partial \tau}\Big|_{k,n}\cong(R_n^k-R_{n-1}^k)/\Delta\tau \qquad (۳۹)$$

$$R_n^{k+1}=R_n^k+f(R_n^k, \tau_n)\Delta\lambda-g(R_n^k, \tau_n)(R_n^k, \tau_n)(R_n^k-R_{n-1}^k)(\Delta\lambda/\Delta\tau) \qquad (۴۰)$$

باید توجه داشت که درامتداد محور افقی مقدار $\tau=0$ است. بنابراین طبق شرایط مرزی معادله (۹ ۳) مقدار R در هریک از رئوس واقع بر روی این محور باید صفر باشد یعنی بازاء ۰۰۰۰۰۰ و ۲ و ۱ $k=$ مقدار $R_1^k=0$ و بهمین ترتیب درامتداد محورعمودی که $n=0$ است داریم $R_n^1=0$ است برای محاسبه $R_2^2$ در معادله (۱۲) مقدار $k=2$ و $n=2$ اختیار میکنیم چون تمام عبارات طرف راست معادله (۱۲) معلوم است مقدار $R_2^2$ محاسبه نمود. با تغییراندیس‌های n و k میتوان مقدار $R_n^k$ درهر راس شبکه واقع درصفحه $\lambda-\tau$ را بدست آورد .

## مثال عددی

در مورد مساله جذب گاز که دربالامطرح شد اولا فرض میکنیم $y^\circ$ یعنی مقدر y که در حال‌تعادل با x است از منحنی تعادل بدست‌آید بنابراین بآسانی میتوان معادله‌ای نوشت که منطبق به‌ارقام تعادل باشد. به‌بیان دیگر فرض میکنیم a و b و c ثابت های معادله مطلوب $y^\circ=a=+bx+cx^2$ از طریق مربع های حداقل least–square بدست آمده باشند. مقدار $k'_y a_i s/L$ و $k'_y a_i s/v$ را بترتیب برابر A و B فرض‌میکنیم.

$$A=k'_y a_i s/L$$

$$B=k'_y a_i s/v$$

درنتیجه معادلات (۳۵) و (۳۶) بصورت زیر در میآید :

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dz}=B(y-a-bx-cx^2)(1-y) & (۴۱)\\[2mm] \dfrac{dx}{dz}=A(y-a-bx-cx^2)(1-x) & (۴۲)\\[2mm] y(\lambda)=\tau \\ x(0)=0 \\ x(\lambda)=r(\tau,\lambda)=R \end{cases}$$

و معادله مشتق نسبی(۱۳) بصورت زیر میگردد :

$$\frac{\partial R}{\partial \lambda}+[B(\tau-a-bR-cR^{۲})(۱-\tau)]\frac{\partial R}{\partial \tau}=[A(\tau-a-bR-cR^{۲})(۱-R)] \quad (۴۳)$$

بااستفاده از روابط (۳۸) و (۳۹) داریم :

$$R_n^{k+۱}=R_n^k+AH(۱-R_n^k)\Delta\lambda-BH(۱-\tau_n)(R_n^k-R_{n-۱}^k)(\Delta\lambda/\Delta\tau) \quad (۴۴)$$

که درآن :

$$H=\tau_n-a-bR_n^k-c(R_n^k)^{۲}$$

برای سادگی فرض میکنیم :

$$c=۰ر۰۱ \;,\; b=۲ \;,\; a=۰ \;,\; A=B=۲$$

باشد مقدار $\Delta\lambda$ و $\Delta\tau$ راهم برابر ۰ر۱. فرض میکنیم طبق شرایط حدی بازاء :

$$R_۱^k=R_n^۱=۰ \quad و \quad n=۱و۲و\cdots \quad و \quad k=۱و۲و\cdots$$

است. برای تعیین $R_۲^۲$ مقدار $k=۱$ و $n=۲$ اختیار میکنم وبا استفاده از معادله (۴۴) مقدار $R_۲^۲$ برحسب $R_۲^۱$ و $R_۱^۱$ و $\tau_۲$ بدست میآید. ولی چون :

$$H=۰ر۱ \quad و \quad \tau_۲=(۲-۱)\Delta\tau=۰ر۱ \quad و \quad R_۲^۱=R_۱^۱=۰$$

پس نتیجه میشود $R_۲^۲=۰ر۰۲$

برای تعیین $R_۳^۲$ در معادله (۴۴) $k=۱$ و $n=۳$ اختیار میکنیم $R_۳^۲$ برحسب $R_۳^۱$ و $R_۲^۱$ و $\tau_۳$ بدست میآید. وچون :

$$H=۰ر۱ \quad و \quad \tau_۳(۳-۱)\Delta\tau=۰ر۲ \quad و \quad R_۳^۱=R_۲^۱=۰$$

است مقدار $R_۳^۲=۰ر۰۴$ میشود .

بهمین ترتیب میتوان مقدار $n$ را زیاد کرده تا مقدار $R_۴^۲$ و $R_۵^۲$ بدست‌آید . پیشروی در روی محور قائم را آنقدر ادامه میدهیم تابه $\tau$ مورد نظر برسیم سپس $k=۲$ اختیار میکنیم و اعمال فوق را تکرار میکنیم تا مقادیر $R_۴^۳$ و $R_۳^۳$ و $R_۲^۳$ بدست میآید و دومرتبه به‌مقدار $\tau$ برسیم. مثلاً درمورد $k=۲$ و $n=۲$ با درنظر گرفتن معلومات زیر :

$$H=۰ر۰۱۹۹۹ \quad و \quad R_۲^۲=۰ر۰۲ \quad و \quad \tau_۲=۰ر۱$$

مقدار ۰٫۰۲۲۳۸$=R_2^3$ میشود . این اعمال را میتوان برای $k=$۳و۴و۵ ادامه داد تا مقدار R برای هر راس شبکه τ—λ بدست آید .

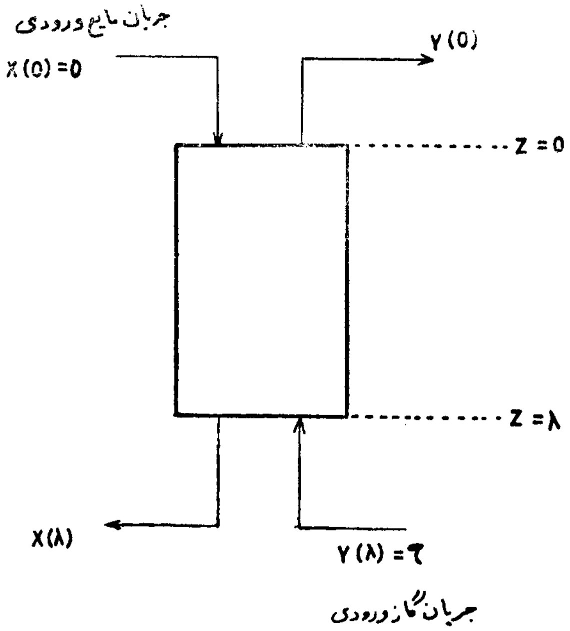
تا اینجا غلظت ملکولی مایع خروجی x(λ) برحسب مقادیر مختلف λ و τ محاسبه میشود .

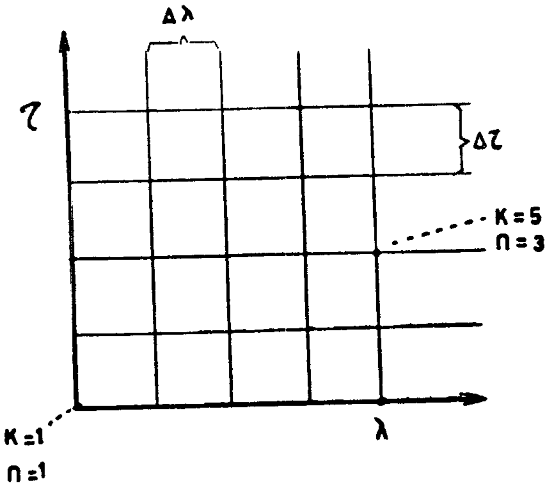
حال با استفاده از بیلان کلی مواد غلظت ملکولی گاز خروجی y(۰) متناظر با هر x(λ) محاسبه میشود . بدین ترتیب دومساله طراحی همزمان حل میشود .

حال ببینیم درصورتیکه مقدار غلظت ملکولی گاز ورودی (τ) معلوم باشد چگونه میتوان ارتفاع لازم λ برج را محاسبه کرد تا غلظت ملکولی مایع خروجی برابر x(λ) گردد . بااستفاده از معادله (۴۰) و مطابق روش فوق میتوان روی دیاگرام به τ مورد لزوم رسید . سپس این عمل را برای مقادیر دیگر k ادامه میدهیم تا مقدار $R_n^k$ محاسبه شده با R(λ) مورد نظر تطبیق کند . دراینصورت مقدار λ عبارت از ارتفاع برج خواهد بود .

**کاربرد Inv—Imb درمسائل دیگر unit operation :**

با مراجعه به کتاب های unit operation مشاهده میشود که قلیلی از فرایندهای مداوم با جریان برعکس نظیر مبادل های حرارتی ـ ستون تقطیر ـ برجهای خنک کن . ستون های جذب وجود دارند که میتوان آنها را مطابق حل معادلات (۱) و (۲) حل نمود . این متد برای شمارگرهای عددی digital بسیار مناسب



میباشد هربارکه مقدار R دریک نقطه شبکه تعیین میشود یک مسأله بخصوص حل میگردد. بنابراین میتوان ارتباط عددی بین مقادیر خروجی - ارتفاع - و مقادیر ورودی را تعیین نمود این ارتباط در انتخاب طرح اپتیمم بسیار حائزاهمیت است.

## علائم اختصاری

| | |
|---|---|
| سطح موجود درواحد Packing | $a_i$ |
| ضرب کلی انتقال جرم وقتی نیروی محرکه برحسب جزء ملکولی بیان شود (فازگاز) | $k'_y$ |
| ضریب کلی انتقال جرم وقتی نیروی محرکه برحسب جزء ملکولی بیان شود (فازمایع) | $k'_x$ |
| شدت جریان ملکولی مایع | $L$ |
| سطح مقطع ستون | $S$ |
| شدت جریان ملکولی گاز | $V$ |
| جزء ملکولی درفازمایع | $x$ |
| معادل تعادلی y | $y^\circ$ |
| ارتفاع ستون | $\lambda$ |

## منابع


1—Industrial and Engineering Chemistry, September 1960.
2—AICHE Journal July, 1970.
3—Chemical Engineering, September 1967.