

Gulyás Lajos

A KIBŐVÍTETT DAMKÖHLER EGYENLET MINT RENDSZEREZŐ ELV A VEGYÉSZMÉRNÖKI TUDOMÁNYBAN

A vegyészmérnöki tudomány a negyedik primer mérnöki tudomány, amely az anyag kémiai összetételének megváltoztatásával nagyipari termelést valósít meg. Kialakulása az 1930-as években, Németországban G. Damköhler munkásságával kezdődött, és a II. világháború végére az USA-ban fejeződött be. Hazánkban a vegyészmérnöki tudományt két nemzetközileg ismer, és elismert tudós Benedek Pál és László Antal [1] alapozták meg és fejlesztették tovább.

1. BEVEZETÉS

A világ vegyipari termelésének statisztikai adatait tanulmányozva az 1930-as évek legelején nagy fellendülést tapasztaltak [2]. Itt azonban nem a nagy gazdasági világválságot követő konjunkturális jelenségről van szó, hanem valami másról, nevezetesen a modern vegyi nagyipar megszületéséről. A hangsúly itt a nagyiparon van. Új gyártási ágak alakultak ki, amelyeknek a régiekhez képest nagy a gyártási volumenük, amelyekben uralkodó a folytonos üzemű termelés, és a kiterjedt gépesítés, intenzifikálás és automatizálás következtében nagy a munka termelékenysége. Ennek a modern vegyi nagyiparnak az elsősülöttje ekkor már vagy húszesztendős. Az ammóniaszintézisről van szó, amelyet a maga eredeti formájában tulajdonképpen két kivételes képességű tudós rendkívüli hozzájárulásával valósult meg. Az egyik F. Haber kémikus, a másik K. Bosch gépészmérnök volt. Haber a munka tárgyának oldaláról oldotta meg a szintézis problémáját, kimutatván a konverzió elvi határait, és mert megtalálta az első effektív katalizátort, Bosch a munkaeszközöket konstruálta meg, elsősorban a nagy nyomású és magas hőmérsékletű konvertert. Ez a magyarázata, hogy Németországban sokáig tartotta magát az a nézet és az ennek megfelelő vállalati szervezet, hogy a vegyi nagyipar a Chemiker és a Verfahrenstechniker együttműködésekként termel és fejlődik tovább.

2. A VEGYÉSZMÉRNÖKI TUDOMÁNY KIALAKULÁSA

Egészen az 1930-as évekig a vegyészmérnöki tevékenység úgy folyt, hogy mindig külön-külön, az esetnek megfelelően végezték a tervezést, a készüléképítést, a kivitelezést és az üzemeltetést. Nem voltak egységes alapelvek, amelyek segítségével úgy tudtak volna tervezni, mint például a gépész- vagy villamos mérnökök. Köztudomású hogy a villamosmérnöki tudomány azután jutott túl az empirián és dolgozták ki sajátos elméletét, miután Maxwel 1878-ban megalkotta híres egyenleteit. Érdekes, hogy e gyakorlat és az I. G. Farbenindustrie virágkorában éppen Németországban írta meg G. Damköhler azokat az alapvető munkáit [3], amelyeket sem, a kémikusok sem a gépészmérnökök nem méltattak a maga érdemének és jelentőségének megfelelően. Damköhler kimutatta, hogy a modern vegyi nagyipari termelés folyamataiban sajátos és jellegzetes törvények uralkodnak, amelyek nem a kémiából és a gépészmérnöki tudományból következnek, hanem a kémiai értelemben vett anyag egyes tulajdonságainak olyan mozgásaiból, amelyek éppen a vegyi nagyipari termelés folyamataiban nyilvánulnak meg sajátosan és jellegzetesen. Tulajdonképpen itt három nevezetes mennyiségnek, az impulzusnak, a komponensnek, és a hőnek az együttes mozgásáról van szó, amely speciális esetként tartalmazza az áramlást és a hőt is. Ugyanebben az időben az Egyesült Államokban a vegyipari termelés tapasztalatainak tudományos megfogalmazása némiképpen más irányban haladt. Az absztrakció nem volt olyan mélyreható, mint Damköhlernél, de észrevették, hogy az egymás mellett létező legkülönbözőbb gyártási eljárásokban olyan készülékeket és ezekben végbemenő olyan jelenségeket lehet felfedezni, amelyek jellegükben hasonlóak. Ezek tanulmányozása vezetett az egyedi műveletek felismeréséhez, és az egyedi műveletek praktikus elméletének kidolgozásához. Mindez viharos gyorsasággal történt, körülbelül egy vagy másfél évtized alatt, és a második világháború után lényegében, alapjaiban, fő vonásaiban már készen állt a vegyészmérnöki tudomány, amely már nem a gépészmérnök készülékeszkészítési szemüvegén keresztül mutatta be az egyedi műveleteket, hanem a vegyészmérnök méretezési és üzemviteli szempontjai szerint. Ekkoriban már világos és bizonyított volt, hogy a vegyészmérnök se nem vegyész némi gépészeti tudással, se nem gépészmérnök némi vegyészeti tudással, hanem önálló működési területe van.

3. A VEGYÉSZMÉRNÖKI TUDOMÁNY FUNDAMENTÁLIS EGYENLETEI

A vegyiparban a kémiai átalakítást lebonyolító reaktorok méretezése alapvetően fontos mérnöki feladat. Mégis az a furesa helyzet állt elő, hogy viszonylag későn kezdtek hozzá e feladat kidolgozásához és tudományos igényű megoldásához. Más vegyipari műveleteknél, mint például a rektifikálás esetében már évtizedekkel korábban viszonylag jól kialakult számítási eljárások álltak rendelkezésre. A vegyipari reaktorok esetében sokáig úgy gondolták, az egyetlen dolog, amit figyelembe kell venni, a kémiai reakció időbeli lejátszódása, ahogy azt a klasszikus reakció kinetika kis méretekben tanítja. Évtizedeken át közismert tény volt, hogy, elsősorban laboratóriumban, szakaszos reaktorokban sok kémiai reakciót lehet lejátszani viszonylag jó hatásfokkal. Amikor azonban ezt a kémiai reakciót folyamatos üzemű áramló rendszerekre terjesztették ki, a konverzió lényegesen lecsökkent. Ezért a kutatók levonták azt a kvantitatív következtetést, hogy nagyobb térfogatú reaktort kell építeni, mint a nyugvó rendszerű szakaszos reaktor tárfogata. A témával először Bodenstein és Wolgast, később Langmuir foglalkozott [3], de ők még nem vetették fel a reaktorok méretezésének kérdését.

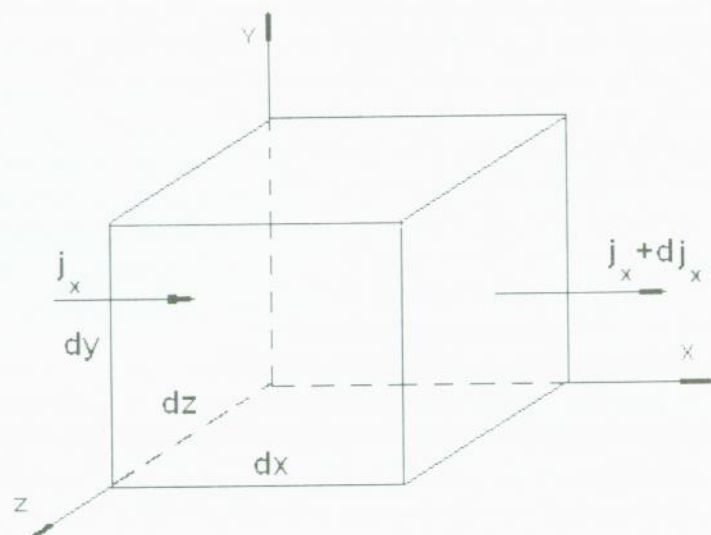
3.1. A Damköhler egyenlet

G. Damköhler 1936-ban megjelent első közleményében [3] már a mérnök szempontjából a méretnövelés problémáját veti fel. A kérdésfelvetés után helyes elméleti alaphoz indul ki. Megfogalmazza a komponensre, az impulzusra és a hőre azokat az alapvetően fontos egyenleteket, melyek áramló rendszerekben a kémiai reakcióra jellemzőek. Damköhler leleménye az volt, hogy a megmaradási tételt kifejező klasszikus kontinuitási egyenletet, amely konvektív tagból és lokális változásból áll, kibővítette a vezetéssel, és ami a lényeg, a kémiai reakciókat leíró forrás taggal. Ez tette lehetővé, hogy egy hőcserélőből például kémiai reaktort csináljon. A Damköhler egyenlet levezetéséhez, az 1. ábra szerint, tekintsünk egy tetszőleges vegyipari műveleti egység térfogatelemét, amelyben egy általánosított $\mathbf{j}$ áramsűrűség vektor megváltozhat. Az ábra alapján, egy derékszögű koordináta rendszerbe egy dV térfogatú egységelemet helyeztünk. A $\mathbf{j}$ áramsűrűség j_x , j_y és j_z komponenseinek megváltozására az alábbi egyenleteket írhatjuk:

$$j_{x+dx} - j_x = \frac{\partial j_x}{\partial x} dx = dj_x, \quad (1)$$

$$j_{y+dy} - j_y = \frac{\partial j_y}{\partial y} dy = dj_y, \quad (2)$$

$$j_{z+dz} - j_z = \frac{\partial j_z}{\partial z} dz = dj_z. \quad (3)$$



1. ábra. Az elemi térfogaton x irányban fluidum áramlik keresztül

Az egyes áramsűrűség változásaiból, a mérőleges egységfelülettel történő szorzással állíthatjuk elő az áramerősség differenciális megváltozásait:

$$dI = dj_x dydz + dj_y dxdz + dj_z dxdy = \left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \right) dV. \quad (4)$$

Átrendezés után

$$\frac{dI}{dV} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}. \quad (5)$$

A (5) egyenlet jobb oldalát a $\mathbf{j}$ áramsűrűség vektor divergenciájának hívjuk és $\text{div } \mathbf{j}$ -vel jelöljük:

$$\frac{dI}{dV} = \text{div } \mathbf{j}. \quad (6)$$

A levezetés szerint a térfogatelemen átmenő áramsűrűség komponensek differenciális megváltozásainak összege azonos az I áram V térfogatában történt megváltozásával. Stacionárius esetben a dV térfogatban előálló, vagy „eltűnő” dI áramot G forrásként vagy nyelőként értelmezzük:

$$G = \frac{dI}{dV}. \quad (7)$$

Stacionárius, forrásmentes rendszerekben:

$$\text{div } \mathbf{j} = 0. \quad (8)$$

Euler szerint instacionárius, forrásmentes rendszerben a térfogatelemen átmenő áramsűrűség komponensek megváltozásainak összege azonos a rendszer Γ általánosított sűrűségének idő szerinti megváltozásával, röviden a lokális változással:

$$\text{div } \mathbf{j} = -\frac{\partial \Gamma}{\partial t}. \quad (9)$$

A (9) összefüggés a klasszikus kontinuitási egyenlet. Amennyiben a rendszerben a lokális megváltozástól független forrás tag is szerepel, akkor,

$$\text{div } \mathbf{j} = G - \frac{\partial \Gamma}{\partial t} \quad (10)$$

egyenlethez jutunk. A (10) egyenletben a $\mathbf{j}$ áramsűrűség vektor lehet konvektív:

$$\mathbf{j}_{\text{konv}} = \Gamma \mathbf{v} \quad (11)$$

és lehet vezetéses, amit Fick komponensre, Fourier hőre és Newton impulzusra értelmezett azonos módon:

$$\mathbf{j}_{\text{vez}} = -\delta \text{grad } \Gamma. \quad (12)$$

A (11) egyenletben a $\mathbf{v}$ sebesség vektort, és a (12) egyenletben δ az általánosított vezetési tényezőt jelöli. A negatív előjel azt fejezi ki, hogy az áramlás a nagyobb sűrűségű (potenciálú) helytől a kisebb sűrűségű hely felé irányul. A (11) és (12) egyenleteket a (10) egyenletbe helyettesítve kapjuk:

$$\text{div } \mathbf{j}_{\text{konv}} + \text{div } \mathbf{j}_{\text{vez}} = G - \frac{\partial \Gamma}{\partial t}. \quad (13)$$

A (13) egyenletbe beírva a $\mathbf{j}_{\text{konv}}$ és $\mathbf{j}_{\text{vez}}$ tagokat:

$$\text{div}(\Gamma \mathbf{v}) + \text{div}(-\delta \text{grad } \Gamma) = G - \frac{\partial \Gamma}{\partial t}. \quad (14)$$

A (14) Damköhler-ről elnevezett egyenlet olyan megmaradási tételt fejez ki, amely adott peremfeltételek ismeretében térben és időben folyamatosan leírja, a vizsgált műveleti egységet alkotó készülékben a komponens, hő, impulzus vagy egyéb energetikai viszonyokat. Damköhler mutatott rá először a tartózkodási idő jelentőségére. Köztudomású, hogy az óta ez a fogalom központi jelentőségűvé vált, és elsősorban Danckwerts munkái nyomán kifejlődött a tartózkodási idő eloszlás elméleti tárgyalása és gyakorlati mérés technikája [4].

3.2. A kibővített Damköhler egyenlet

A vegyészmérnöki tudomány ige nagy területét fedik le a fázisátadással, a fázisok közötti, komponens hő és impulzus átadással járó folyamatok. Két különböző fázis határán általában igen bonyolult viszonyok állnak elő. Az áramlástan egyik alapvető fogalmává vált Prandtl-nak az a felismerése, hogy az áramló közeg határán van egy vékony határréteg, amelyben hirtelen változik a sebesség, azaz nagy a sebesség gradiense. Tőle függetlenül Nernst a koncentrációnak hasonló hirtelen változását tapasztalta a fázis határán. Kiderült végül is, hogy ez a jelenség is általános, mint az egyes áramok egymástól függetlenül felismert törvényei. A fázisok határára jellemző, hogy ott egy vékony rétegben, filmben a koncentráció, hőmérséklet és a sebesség hirtelen erős változást mutat. Az érintkező két fázis határán természetesen két ilyen film

helyezkedik el. A (14) egyenletben a konvektív és vezetéses áramra vonatkozó összefüggések csak a fázis határfelületéig érvényesek. A fázis határfelületén a képletben szereplő intenzív állapothatározók törést mutatnak, sőt a koncentráció rendszerint szakadást is. E határrétegbeli változás explicit formáját nem tudjuk folytonos függvény alakjában előállítani. E nehézségek miatt a fázisok közötti áramok leírására tapasztalaton nyugvó képletet használunk. A tapasztalat azt mutatja, hogy a fázisok közötti I áram nagysága arányos a fázisok közötti érintkezési A felülettel és a fázisok belsejében levő $\Delta \Gamma$, töménység-, hőmérséklet- és sebesség különbséggel:

$$I = \varepsilon A \Delta \Gamma. \quad (15)$$

A (15) összefüggés egyben az ε általánosított átadási tényező definiáló egyenlete is. A (14) Damköhler egyenletet tovább bővíthetjük az átadási áram megfelelő kifejezésével. Ezen azt értjük, hogy az átadási áram értékét úgy, mint a (14) egyenletben, térfogategységre kell vonatkoztatni, mivel csakis így lehet a (15) egyenletet additív tagként hozzáírni:

$$\frac{I}{V} = \varepsilon \frac{A}{V} \Delta \Gamma = \varepsilon \omega \Delta \Gamma. \quad (16)$$

A (16) egyenletben az $\omega = A/V$ hányados a fajlagos felület, a vegyipari műveletekben igen fontos tényező, amely megadja, hogy a készülék térfogategységére vonatkoztatva mekkora felület áll rendelkezésre, az átadásra. Tehát a (14) Damköhler egyenletet a (16) egyenlettel kibővítve kapjuk a műveleti egységet leíró általános mérlegegyenletet:

$$\text{div}(\Gamma \mathbf{v}) + \text{div}(-\delta \text{grad } \Gamma) + \varepsilon \omega \Delta \Gamma = G - \frac{\partial \Gamma}{\partial t}. \quad (17)$$

A (17) egyenlet öt tagból áll:

$$\text{Konvekció} + \text{Vezetés} + \text{Átadás} = \text{Forrás} - \text{Lokális változás}.$$

Vagy röviden:

$$K + V + \dot{A} = F - L.$$

A (14) egyenlet kibővítését az átadási taggal Benedek Pál és László Antal végezték el [1]. Itt azonban vigyázni kell, mert az átadási taggal történő kibővítésnek csak tökéletes kiszorítás esetén van értelme és jogosultsága. Ha a tökéletes kiszorítástól eltekintünk, vagyis az általános esetet tárgyaljuk, akkor az átadási áram, vezetés-diffúzió útján jut a fázisba, és az átadási tag megszűnik, illetve peremfeltétellé alakul. Ezen kis „hibája” ellenére a (17) kibővített Damköhler egyenletet joggal tekinthetjük a vegyészmérnöki tudomány fundamentális egyenletének, mivel kellőképpen általános és kényelmesen konkretizálható. Ezután a vegyészmérnöki tudomány már „csak” annak a hidnak a felépítésére vállalkozott, amely az absztrakt, a gyökerekig ható damköhleri alapvetés és az egyedi műveletek praktikus elmélete között hiányzott. A kibővített Damköhler egyenlet segítségével többek között, a vegyipari műveleteket kényelmesen rendszerbe foglalhatjuk. A Γ , a δ , az ε , a $\Delta\Gamma$, és a G helyére beírjuk a jellemző mennyiségek megfelelő értékeit, akkor tömegre, komponensre, hőre és impulzusra kapjuk az általános mérleg egyenletet. A (17) egyenletbe a Γ helyére ρ sűrűséget, a δ helyére D^* öndiffúziós állandót, ε helyére β^* tömegátadási tényezőt és $\Delta\Gamma$ helyére $\Delta\rho$ tömegsűrűség különbséget írunk, akkor tömegre írhatjuk fel az általános mérleg egyenletet:

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) + \operatorname{div}(-D^* \operatorname{grad} \rho) + \beta^* \Delta \rho = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (18)$$

A tömegre felírt mérleg egyenletben értelemszerűen tömegforrás nem szerepel. Viszont, ha a (17) egyenletbe rendre beírjuk a c_i koncentrációt, a D diffúziós állandót, a β komponensátadási tényezőt és a G helyébe $v_i r$ komponensforrást, akkor komponensre kapjuk meg az általános mérleg egyenletet:

$$\operatorname{div}(c_i \mathbf{v}) + \operatorname{div}(-D \operatorname{grad} c_i) + \beta \Delta c_i - v_i r = -\frac{\partial c_i}{\partial t}. \quad (19)$$

A (19) egyenletben v_i a reakcióegyenlet sztöchiometriai koefficiensét és r a reakció sebességét jelöli. Amennyiben a megfelelő tagokat $\rho c_p T$ hősrűséggel, λ hővezetési tényezővel, ΔT hőmérséklet különbséggel, és $v_i r \Delta H$ reakció hővel helyettesítjük, akkor hőre kapjuk meg az általános mérleg egyenletet:

$$\operatorname{div}(\rho c_p T \mathbf{v}) + \operatorname{div}(-\lambda \operatorname{grad} T) + \alpha \Delta T - v_i r \Delta H = -\frac{\partial (\rho c_p T)}{\partial t}. \quad (20)$$

A (20) egyenletben ΔH a reakció hőjét jelöli. Végül a (17) általános transzportegyenletbe a Γ helyére $\rho \mathbf{v}$ vektort, δ helyére η dinamikus viszkozitást, az ε helyére γ impulzus átadási tényezőt, valamint G helyébe $\operatorname{grad} p - \rho \mathbf{g}$ impulzus forrást írunk, akkor a mozgás mennyiségre kapjuk a következő megmaradási egyenletet:

$$\operatorname{Div}\{\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}\} + \operatorname{Div}\{-\eta \operatorname{Grad} \mathbf{v}\} + \gamma \Delta \mathbf{v} + \operatorname{grad} p - \rho \mathbf{g} = -\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t}. \quad (21)$$

A (21) egyenlet vektoregyenlet tulajdonképpen a Navier-Stokes egyenlet, és a nagy kezdőbetűvel jelzett Div nem egyszerű divergencia, mert a kapcsos zárójelbe tett mennyiségek másodrendű tenzorok.

3.3 A kibővített Damköhler egyenlet egyszerűsített alakjai

A vegyipari művelettan szempontjából fontos intenzív változók, a hőmérséklet, a koncentráció és a nyomás, a műveleti egységben kialakult sebesség profiltól függenek. A sebességprofil a (21) impulzus megmaradást kifejező mérlegegyenlet alapján tanulmányozható. Ez általában bonyolult feladat, mivel a sebességprofil, az adott berendezés hidrodinamikai viszonyaitól is erősen függ. A probléma megoldása érdekében egyszerűsített hidrodinamikai modelleket állítunk fel, melyek alapján sebességprofilokat tételezünk fel, és ennek megfelelően írjuk fel a mérlegegyenleteket. Ez az egyszerűsítés azt vonja maga után, hogy az adott modellek, a molekuláris anyagi tulajdonságok által egyértelműen meghatározott paraméterei torzulnak és a hidrodinamikai viszonyok bonyolult függvényeivé válnak. A vegyészmérnöki tudomány egyszerűsített matematikai modelljeire jellemzők hogy azok a (17) differenciálegyenletből adódnak különböző mértékű egyszerűsítésekkel. Attól függően, hogy a modell az általánosított sűrűségfüggvényt a berendezés belsejében folytonosan vagy nem folytonosan differenciálható függvényként írja le, megkülönböztethetünk folytonos és kaszkád modelleket.

A (17) egyenletből, a vegyipari berendezés hidrodinamikai képének megfelelő egyszerűsítésekkel három alapvető folytonos modellt vezethetünk le.

1. Axiális keveredést tartalmazó diffúziós modell:

$$v_z \frac{\partial \Gamma}{\partial z} - \delta_z \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z^2} + \varepsilon \Delta \Gamma = G - \frac{\partial \Gamma}{\partial t}. \quad (22)$$

A modell két paraméteret tartalmaz, a v_z átlagos áramlási sebességet és δ_z axiális keveredési tényezőt, amely értéke a fázis teljes térfogatában állandó. Ezzel a modellel írhatjuk le a visszakeveredéssel áramlású csövet. E modell szerint a konvektív mennyiségátvitelt a dugószerű áramlás hatására korlátozzuk, a helyi konvektív áramok és a molekuláris diffúzió együttes hatását az axiális keveredési tényező bevezetésével a vezetési tagon keresztül vesszük figyelembe.

2. Ideális kifolyási modell: A szakirodalomban a legelterjedtebben használt modell. Az axiális keveredést tartalmazó egydimenziós diffúziós modellel úgy származtatható, hogy az axiális keveredési tényezőt nullának tekintjük:

$$v_z \frac{\partial \Gamma}{\partial z} + \varepsilon \varpi \Delta \Gamma = G - \frac{\partial \Gamma}{\partial t}. \quad (23)$$

Tulajdonképpen ez felel meg a dugószerű áramlási képnek. A dugószerű áramlás szükséges és elégséges feltétele, hogy a fluidum elemek azonos tartózkodási idővel rendelkezzenek és nyilvánvalóan az egyes fluidum elemek egyéb tulajdonságainak, összetétel, hőmérséklet, is azonosnak kell lennie.

3. Ideális keveredési modell: Az axiális keveredést tartalmazó diffúziós modell másik határeset. Az axiális keveredési tényező értéke ugyan minden határon túl nő, de a $\text{grad } \Gamma$ nullává válik. Ez a modell a (17) differenciálegyenlet térfogatra integrált alakjából származtatható:

$$\frac{v}{z} (\Gamma_{ki} - \Gamma_{be}) + \varepsilon \varpi \Delta \Gamma = G - \frac{d\Gamma_{ki}}{dt}, \quad (24)$$

illetve

$$B(\Gamma_{ki} - \Gamma_{be}) + \varepsilon A \Delta \Gamma = VG - V \frac{d\Gamma_{ki}}{dt}. \quad (25)$$

A (24) és (25) egyenleteket integrális mérlegegyenleteknek nevezzük. A (25) egyenletben szereplő B a térfogatáramot jelöli. E modell szerint az általánosított sűrűség a fázis belsejében mindenütt azonos.

A kaszkád modelleket főleg ott használjuk, ahol a fázis térfogata N darab részre van felosztva, és amelyben a sűrűséget valamilyen egyszerű függvénnyel leírhatónak tételezzük fel. Az egyes térfogatrészek között a mennyiségforgalom konvektív áramokra korlátozható. A modell az általánosított sűrűséget szakadáson, nem deriválható függvény szerint írja le a fázistérfogatban. A

kaszkád modellek alapjául leggyakrabban az ideális keveredési modell szolgál. Ez esetben az általánosított sűrűség értéke az adott térfogatrészben állandó. Minden egyes térfogatrészre felírható egy, az ideális keveredési modellel bemutatott (25) egyenlet. A modell a forrás tagtól függően N darab elsőrendű nem lineáris differenciálegyenlet rendszer. Stacionárius esetben a lokális változás nulla, így a differenciálegyenlet rendszer nemlineáris egyenletrendszerre válik.

4. A VEGYIPARI MŰVELETEK RENDSZEREZÉSE AZ ÁLTALÁNOS MÉRLEGEGYENLET ALAPJÁN

A vegyipari műveleti egységet, alkotó készülékeket csoportosíthatjuk a fázisok áramlása és benttartózkodása szempontjából. Ezek szerint a készülékek lehetnek szakaszosak és folyamatosak, tehát különbözhetnek a hőmérséklet, koncentráció és nyomás időbeli változásában és térbeli eloszlásában. A csoportosítás alapja a részecskék tartózkodási idő eloszlás- és sűrűség függvényei [4], ami egy készülékre orientált csoportosítást tesz lehetővé. A két szélső határeset, az ideális keveredési- és az ideális átfolyási modellel leírható készülékek között, a vegyiparban használatos valamennyi berendezés áramlástanai szempontból, viszonylag kis számú csoportba sorolhatók, és ezek a készülékek az elméleti kaszkád szám és/vagy az axiális diszperzió állandó meghatározásával egyértelműen minősíthetők.

A vegyipari műveleteket csoportosíthatjuk aszerint, hogy (17) egyenlet öt tagjából melyek a meghatározó áramformák, és csoportosíthatjuk aszerint, hogy melyik jellemző mennyiségre, komponensre (19) és/vagy hőre (20) vagy, impulzusra (21) írjuk fel a mérleg egyenletet.

4.1. Csoportosítása a meghatározó áramformák szerint

Az egyes műveleti egységekben lejátszódó folyamatokat a gyakorlati szempontok figyelembevételével a domináló áramformák szerint szoktuk jellemezni, ugyanis a kibővített Damköhler egyenlet teljes körű öt áramformája nem azonos hatással érvényesül. Általában két vagy ritkább esetben három áramforma a jellemzően meghatározó, a többiek ezekhez képest elhanyagolható hatást gyakorolnak. Az esetek többségében a folyamatokat két domináló áramformával tanulmányozhatjuk, amelyeket az öt áramforma lehetséges tízféle ismétlés nélküli kettős kombinációja közül választhatjuk ki. Három kombinációra ugyancsak tízféle változatot kapunk. Ha különbséget teszünk komponens, hő, és impulzus között, akkor a kombinációk száma

megsokszorozódhat. Az 1. táblázatban összefoglaljuk a vegyipari műveleti egységekben a domináló áramformák kettős és hármas kombinációit.

1. táblázat. A vegyipari műveleti egységek csoportosítása az előforduló áramformák szerint.

Sorszám	Két meghatározó áramforma	Három meghatározó áramforma
1	K+V	K+V+Á
2	K+Á	K+V+F
3	K+F	K+V+L
4	K+L	K+Á+F
5	V+Á	K+Á+L
6	V+F	K+F+L
7	V+L	V+Á+F
8	Á+F	V+Á+L
9	Á+L	V+F+L
10	F+L	Á+F+L

4.2 Csoportosítás az alapvető áramló mennyiségek alapján

A kibővített Damköhler egyenlet megteremtette annak lehetőségét, hogy a három alapvető mennyiség, az impulzus-, a hő-, és a komponens mozgásainak törvényeiből kiindulva vezesse le az egyes vegyipari műveletek egységes és általános elméletét, és ebből fejlessze tovább az egyedi műveletek mindegyikének speciális és összehasonlító tárgyalását. A klasszikus felfogás szerinti a hidrodinamika, a hő transzport, a komponens transzport és a vegyipari reaktorok a tárgyalás sorrendje.

4.2.1. A hidrodinamikai műveletek

A hidrodinamikai műveletek csoportjába a folyadékok és gázok, közös néven fluidumok áramlásával kapcsolatos műveleteket soroljuk. Ezen műveletek közös jellemzője, hogy az impulzusra felírt (21) mérlegegyenletből kiindulva tanulmányozhatók. A Navier-Stokes egyenletet a vektoranalízisben szokásos írásmódot alkalmazva, az átadási tagot elhagyva, ismertebb módon is ki lehet fejezni:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v}. \quad (26)$$

A (21) egyenlet a viszkózus folyadékok teljes áramlását fejezi ki. Az egyenlet csak néhány speciális esetben integrálható. Így például, impulzus átadás nélküli $\gamma=0$, tökéletes folyadék $\eta=0$, a z tengely szerinti egyirányú-, egyenletes áramlás valamint a nehézségi gyorsulás z tengely menti komponensének $g_z=-g$ esetében a (21) egyenlet integrálásával a Bernoulli egyenletet kapjuk, melynek a differenciális alakja:

$$v \rho dv + dp + \rho g dz = 0. \quad (27)$$

A Bernoulli egyenlet a fluidum szállítás energia tételét fejezi ki, mely segítségével a súrlódási nyomásvesztés, a fluidum szállítás energia szükséglete számítható.

Amennyiben egy folyadék kis átmérőjű csőben, kis sebességgel laminárisan áramlik stacionárius állapotban, ekkor a tehetetlenségi erő (a konvektív tag) elhanyagolható a súrlódási erőhöz (a vezetéshez) képest. Átadás nem lévén, marad a vezetéses és a forrást jelentő tag, amelyet henger koordináta rendszerben integrálva, kapjuk a Hagen-Poiseuille egyenletet:

$$B = \frac{v d^2 \pi}{4} = \frac{R^4 \pi \Delta p}{8 \eta L} = \frac{d^4 \pi \Delta p}{128 \eta L}. \quad (28)$$

A (28) egyenletben R a cső sugarát, d a cső átmérőjét, L a cső hosszát, v a lamináris áramlás átlagos sebességét és Δp a nyomás különbséget illetve a nyomás veszteséget jelöli. A (28) egyenletet átrendezve:

$$\frac{\Delta p}{\rho} = \frac{64 \eta L}{v d \rho} \frac{v^2}{d^2} = \frac{64 L}{Re d} \frac{v^2}{2} = \lambda \frac{L}{d} \frac{v^2}{2} = \zeta \frac{v^2}{2}. \quad (29)$$

A (29) egyenlet az egységnyi tömegű folyadék energia veszteségét adja meg, ami arányos az áramló folyadék $v^2/2$ fajlagos kinetikus energiájával. A ζ arányossági tényezőt ellenállási koefficiensnek nevezzük. A ζ két dimenziómentes mennyiség az L/d geometriai szimplex és a $\lambda=f(Re)$ csősúrlódási tényező szorzatából áll. A λ a Reynolds szám valamilyen függvényeként előállítható. Lamináris áramlaskor $\lambda = 64/Re$. Az áramlás szilárd szemcsés rétegre vonatkozó alapösszefüggések is a Bernoulli és a Hagen-Poiseuille egyenletekből vezethetők le, amellyel a fluidizáció, a szűrés, a centrifugálás, a szeparálás, az ülepítés és a többi hidraulikus vegyipari műveletek egységes szemléletben tárgyalhatók.

4.2.2. A kétfázisú műveletek

A kétfázisú műveleteknél a cél mindig a komponens, a hő és ritkább esetben az impulzus fázis átmenetének biztosítása. Ezen műveletekben a (15) egyenlettel megfogalmazott átadási áram mindig szerepel. A $\Delta\Gamma$ hajtóerőt általában az egyensúlyi értéktől való eltéréssel adjuk meg:

$$\Delta\Gamma = \Gamma^a - m\Gamma^b, \quad (30)$$

ahol Γ^a és Γ^b az a és a b fázisban a jellemző intenzív mennyiségeket, m az egyensúlyi állandót jelenti. Hőátadásnál $m=1$. Komponens átadással járó folyamatok esetében, ideális fázisoknál, az egyensúlyi összetételt egy lineáris izoterma jellemzi, és az m értékét Rault-, Dalton-, Rault-Dalton-, Nernst-, Henry- és Henry-Dalton törvények határozzák meg. Természetesen egyensúly esetében $\Delta\Gamma=0$. A (17) kibővített Damköhler egyenlet kétfázisú műveletre felírva kapjuk a (31) és (32) egyenletrendszer. A konvektív tag előjele egyenáram esetén pozitív, ellenáram esetén negatív lesz. Az átadási tag a két fázisban megegyezik, csak az előjelük ellentétes.

$$V^a v^a \frac{\partial \Gamma^a}{\partial z} - V^a \delta^a \frac{\partial^2 \Gamma^a}{\partial z^2} + V \varpi (\Gamma^a - m\Gamma^b) + V^a G^a = -V^a \frac{\partial \Gamma^a}{\partial t}, \quad (31)$$

$$\pm V^b v^b \frac{\partial \Gamma^b}{\partial z} - V^b \delta^b \frac{\partial^2 \Gamma^b}{\partial z^2} - V \varpi (\Gamma^a - m\Gamma^b) + V^b G^b = -V^b \frac{\partial \Gamma^b}{\partial t}. \quad (32)$$

A szakaszos kétfázisú berendezésekben, ha csak átadási- és lokális változási tagok szerepelnek, akkor a két egyenletet összeadva az átadási tagok kiesnek és a lokális változások összegére nullát kapunk. Folyamatos stacionárius kétfázisú műveleteknél konvekció és átadási tag szerepel, ekkor a tartály alakú műveleteknél a (25) integrális mérlegegyenlet két fázisra felírt alakját, a kolonna típusú műveleteknél a (31) és (32) differenciális mérleg egyenleteket kell alkalmazni.

4.2.2.1. A hő transzporttal kapcsolatos műveletek

A hő transzporttal kapcsolatos műveletek közül a hő átszármaztatás a leggyakoribb. A hő átszármaztatás egy rendszerrel való hő közlés vagy elvonás műveletét jelenti. A hő átszármaztatás gyakorlati célja változatlan halmazállapotú fázisok közötti hőenergia átadása, hűtés vagy melegítés, vagy halmazállapot változással járó hő átvitel, forralás vagy kondenzáció, illetve

olvasztás vagy fagyasztás megvalósítása. Az áramló fluidumok hőtani viselkedése a (20) egyenlet, a (31) és (32) egyenletek, vagy a kibővített Damköhler egyenlet egyszerűsített változatainak hőre felírt formáiból kiindulva vizsgálhatjuk attól függően, hogy adott esetben az általános transzportegyenlet mely tagjai dominálnak, vagy hagyhatók el. A térben változó hőfoklefutású stacionárius hőcserélőknél a (31) és (32) egyenletek az alábbi alakúak lesznek:

$$V^a v_z^a \rho^a c_p^a \frac{dT^a}{dz} + \kappa A (T^a - T^b) = 0, \quad (33)$$

$$\pm V^b v_z^b \rho^b c_p^b \frac{dT^b}{dz} - \kappa A (T^a - T^b) = 0. \quad (34)$$

A (34) egyenletben a konvektív tag előtt a $+$ előjel az egyen áramú a $-$ előjel az ellenáramú hőcserélőkre vonatkoznak. Hasonlóképpen tanulmányozhatjuk az időben változó hőfoklefutású szakaszos hő átvitelt, valamint a többi itt nem említett hőcserélő típusokat. Például a „kevert-kevert” típusú stacionárius hőcserélőknél a (25) egyenlet hőre felírt alakját alkalmazva:

$$B^a \rho^a c_p^a (T_{be}^a - T^a) - \kappa A (T^a - T^b) = 0, \quad (35)$$

$$B^b \rho^b c_p^b (T_{be}^b - T^b) + \kappa A (T^a - T^b) = 0. \quad (36)$$

A (35) és (36) egyenletekben κ a hő átboesátási tényezőt jelenti.

4.2.2.2. A komponens transzporttal kapcsolatos műveletek

A komponens transzporttal kapcsolatos vegyipari műveletek a vegyészmérnöki tudomány alapvető műveleteit képezik. Ide tartoznak a komponens átadással kapcsolatos műveletek és a vegyipari reaktorok. Amennyiben a komponens átadást kolonna típusú berendezésekben végezzük, és nincs kémiai reakció,

akkor a (31) és (32) egyenletek az alábbi módon egyszerűsödnek:

$$v_z^a \frac{dc_i^a}{dz} + \beta \varpi (c_i^a - mc_i^b) = 0, \quad (37)$$

$$\pm v_z \frac{dc_i^\beta}{dz} - \beta \varpi (c_i^\alpha - mc_i^\beta) = 0. \quad (38)$$

Minthogy a töltelékes kolonnában a diffúzió nem szakaszonként, hanem a kolonna egész hosszában egyenletesen megy végbe, ezért az anyagátviteli egységek használatát vezették be. A fázisok közötti komponens átvadást elvégezhetjük tökéletesen kevertnek tekintett üstszerű berendezésekben. Ebben az esetben a (25) komponensre felírt integrális mérlegegyenlet a két fázisra a (35) és (36) egyenletekhez hasonló alakúak lesznek:

$$B^\alpha (c_{ibe}^\alpha - c_i^\alpha) + V\beta \varpi (c_i^\alpha - mc_i^\beta) = 0, \quad (39)$$

$$B^\beta (c_{ibe}^\beta - c_i^\beta) - V\beta \varpi (c_i^\alpha - mc_i^\beta) = 0. \quad (40)$$

Amennyiben az üstszerű berendezésekben a keveredés intenzitását növeljük, akkor a berendezést elhagyó két fázis jó közelítéssel egyensúlyinak tekinthetők. Ezeknél a berendezéseknél az egyensúlyi egységek, egyensúlyi tényérok, elméleti tényérok használatát vezették be. A (39), (40) mérleg egyenletekből indulhatunk ki, például a tényérok extrakció, abszorpció, rektifikálás tanulmányozásakor.

4.2.3. A vegyipari reaktorok

A komponens transzport nagy csoportját a vegyipari reaktorok alkotják. A vegyipari reaktorokban kémiai reakció játszódik le, tehát a mérlegegyenlet komponensforrást mindig tartalmaz. Tapasztalat szerint a komponens forrás explicit alakját általában két függvény szorzatával adhatjuk meg:

$$v_i r = k(T) f(c_i). \quad (41)$$

A szorzat első tagja a $k(T)$ sebességi állandó, a hőmérséklettől függ, a koncentrációra invariáns, és az esetek többségében a reakciók Arrhenius típusúak, azaz a sebességi állandók a hőmérséklet exponenciális függvényeként megadhatók. A szorzat második tagja az $f(c_i)$ a koncentrációktól függ, a hőmérsékletre invariáns, és a koncentrációk hatványszorzataként előállíthatók. A vegyipari reaktorokat a szerint osztályozhatjuk, hogy a komponensforrás mellett milyen domináló áramforma fordul elő a reaktorban. A reaktorok matematikai modelljei a (19), (20), (22), (23), (24) és (25) egyenletek speciális eseteként

állnak elő. A szakaszos reaktorban a komponensforrás mellett lokális változás szerepel:

$$v_i r = \frac{dc_i}{dt}. \quad (42)$$

A folyamatos reaktorokban a másik domináns áramforma a konvekció, ekkor a matematikai modell folyamatos ideális esőreaktor esetén:

$$v_z \frac{dc_i}{dz} - v_i r = 0. \quad (43)$$

A tökéletesen kevert stacionárius üstreaktor esetében az integrális mérleg egyenlet kell alkalmazni:

$$B(c_i - c_{ibe}) - V v_i r = 0. \quad (44)$$

A kaszkád reaktor matematikai modelljét a (44) egyenletből vezethetjük le, amennyibe mindegyik kaszkád elemre felírjuk a (44) egyenletet, és ezeket egymásba helyettesítgetjük. Amennyiben a forrás tag mellett komponens átvadási tag szerepel, ekkor a reaktor heterofázisú:

$$\beta \Delta c_i - V v_i r = 0. \quad (45)$$

A diffúziós reaktorokban a másik domináló áramforma a diffúziós áram:

$$\text{div}(D \text{grad}_i) + v_i r = 0. \quad (46)$$

A vegyipari reaktorok termikus viselkedését a reakció során felszabadult hő határozza meg. Ha a reakció hő teljes egészében a reakció elegyben marad, és a reakcióelegy hőmérsékletének a megváltoztatására szolgál, akkor a reaktor adiabatikus. Ha a felszabadult hő teljes egészében a környezetbe megy át anélkül, hogy a reakció elegy hőmérséklete megváltozna, akkor izoterm reaktorról beszélünk. Minden más esetben a reakció hő megoszlik a környezet és a reagáló anyagok között. Tehát a két szélső eset között foglal helyet a politróp reaktor. A vegyipari reaktorok hőtan tanulmányozásához az alapvető áramlástan reaktortípusokra felírt (19) komponens áram mellett a (20) hő áramot leíró mérleg egyenletet is fel kell írni. A mérlegegyenletek megfelelő,

nem meghatározó tagjainak elhagyásával juthatunk el az egyes hőtani reaktor típusokhoz.

5. NAPJAINK VEGYÉSZMÉRNÖKI TUDOMÁNYA

Az utóbbi harminc évben nagyot változott a világ, benne a technika, és benne természetesen a vegyészmérnöki tudomány is. Valami ilyesmiről van szó:

1. A nagyipari folyamatok termékei hosszú időn át maradtak a piacon változatlan minőségben. A mostanában megjelenő termékek élettartama rövid, mert a specifikus használati értékű termékek kiszorítják őket.

2. A nagyipari folyamatok termékei az ár alapján konkurálnak. Az új termékeknél a konkurencia alapja a minőség és a használati érték.

3. A nagyipari folyamatok általában kis molekulájú homogén összetételű közönséges anyagokat állítanak elő, az újdonság az, hogy az új termékek komplex összetételűek, és sokszor struktúrájuk, nem a kémiai összetételük hordozza a használati értéket. Megjelentek a piacon az előírt tulajdonságú, speciális célra szolgáló anyagok.

4. A nagyipari folyamatoknál a termelés minimális költségét a gondos és kifinomult folyamattervezés révén biztosítják. A mostanában megjelenő termékeknél a hangsúly a tulajdonság megtervezésén van.

5. A nagyipari folyamatok szokásos volumenével szemben, a mostanában megjelenő új termékek gyártási volumene kicsi.

6. A nagyipari folyamatok folytonos üzemben működnek. A mostanában megjelenő termékeket szakaszos üzemben gyártják.

7. A nagyipari folyamatok célüzemeivel szemben a rugalmas gyártósorok korszakát éljük.

8. A nagyipari folyamatok irányításához viszonylag kevés, automatikus mérő- és elemző műszert használnak. A mai új termékeknél a minőségbiztosítás eszköztára jóval összetettebb.

9. A nagyipari folyamatoknál a tervezés és irányítás modelljei egyszerűek és a közelítő módszerek szerepe döntő. A mai új termékek esetében a modellek valóság hűsége megnőtt, kifinomultak a numerikus módszerek, kizárólagos a komputer használata.

10. A nagyipari folyamatoknál a kutatás és fejlesztés készülék-berendezés orientált, a mai új termékeknél az R&D a molekuláris szintre figyel és uralkodóvá vált a rendszerszemlélet.

A vegyészmérnöki tudományban elkezdődött a mesterséges intelligencia eszközök, mint például a fuzzy módszerek, a neurális hálózatok, a neuro-fuzzy struktúrák, a genetikai módszerek, a szakértői- és hibrid rendszerek, valamint a kaosz elmélet és a fraktál módszerek széleskörű alkalmazása [5,6,7,8,9]. A mesterséges neurális hálózatokkal kapcsolatos kutatásokat az emberi agy működésének tudományos vizsgálata indította el. A vegyészmérnöki tudomány

alapvető mérlegegyenletei, a többszörösen nemlineáris forrás tagtól függően, erősen nemlineárisak. A különböző neurális modellek közös jellemzője, hogy az önmagukban egyszerű számító elemek, a neuronok megfelelő összekapcsolásával, bármely nemlineáris rendszer tetszőleges pontossággal leírható. Hasonlóképpen építhetők fel fraktál rendszerek is. A neuronok közötti kapcsolat erőssége reprezentálja a hálózat memóriáját. A neurális hálózatok és a fuzzy modellek alkalmazása a neurális modellek tanulási képességére épülnek. A vegyészmérnöki tudomány területén inkább a fuzzy jellegű irányítási modellek terjedtek el, de vannak tanuló típusú, modellbecslés alapján működő neurális rendszerek, sőt vegyes, neuro-fuzzy struktúrák is. A mesterséges intelligencia módszereinek elterjedése a vegyészmérnöki tudományban egy új fejlődési irányzat kezdetét jelenti.

6. JELÖLÉSEK

A = felület (m^2)

B = térfogatáram ($m^3 s^{-1}$)

c_i = az i -ik komponens koncentrációja ($mol m^{-3}$)

c_p = fajhő állandó nyomáson ($J kg^{-1} K^{-1}$)

D^* = öndiffúziós állandó ($m^2 s^{-1}$)

D = diffúziós állandó ($m^2 s^{-1}$)

d = csőátmérő (m)

G = a forrás általános jelölése (mennyiség $m^3 s^{-1}$)

g = nehézségi gyorsulás ($m s^{-2}$)

ΔH = reakcióhő ($J mol^{-1}$)

I = áramerősség (mennyiség s^{-1})

j = áramsűrűség (mennyiség $m^{-2} s^{-1}$)

k = reakció sebességi állandó

L = a cső hossza (m)

m = egyensúlyi arány (-)

p = nyomás (Pa)

R = a cső sugara (m)

r = reakció sebesség ($mol m^{-3} s^{-1}$)

Re = Reynolds szám (-)

T = hőmérséklet (K)

t = idő (s)

V = térfogat (m^3)

v = lineáris sebesség ($m s^{-1}$)

x, y, z = helykoordináta (m)

α = hőátadási tényező ($\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$)
 β = komponensátadási tényező (m s^{-1})
 β^* = tömegátadási tényező (m s^{-1})
 γ = impulzusátadási tényező ($\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$)
 Γ = általánosított sűrűség (mennyiség m^{-3})
 δ = a vezetési áram általánosított tényezője ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
 ε = általánosított átviteli tényező
 ζ = ellenállási együttható (-)
 η = dinamikai viszkozitás ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)
 κ = hő átvezetési tényező ($\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$)
 λ = csőáramlási tényező (-)
 λ = hő vezetési tényező ($\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$)
 ν = kinematikus viszkozitás ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
 ν_i = az i-ik komponens sztöchiometriai együtthatója
 ρ = tömegsűrűség (kg m^{-3})
 ω = fajlagos felület (m^{-1})

7. IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] Benedek Pál, László Antal: A vegyészmérnöki tudomány alapjai. Műszaki Könyvkiadó, Budapest (1964).
- [2] Benedek Pál: Örökzöld témák. A kutatás irányítása, tervezése és szervezése. Tudományszervezési füzetek. Akadémiai kiadó, Budapest (1979).
- [3] László Antal, Bakos Miklós: A vegyészmérnöki tudomány klasszikusai. Válogatott tanulmányok. Tankönyvkiadó, Budapest (1971).
- [4] Himmelblau, D. M. – Bischoff, K. B.: Process Analysis and Simulation. Wiley, New York (1968).
- [5] Lin, C. T. and C. S. G. Lee: Neural Fuzzy Systems. A neuro-Fuzzy Synergism to Intelligent Systems. Prentice Hall N.Y. (1996).
- [6] Kóczy László, Tikk Domokos: Fuzzy rendszerek. Típotex Kiadó Budapest (2000).
- [7] Horváth Gábor: Neurális hálózatok és műszaki alkalmazása. Műegyetemi Kiadó, Budapest (1998).
- [8] Hastings, H. M. and Sugihara, G.: Fractals, A User's Guide for the Natural Sciences. University Press, Oxford (1993).
- [9] Ajtonyi István, Gyuricza István: Programozható irányítóberendezések, hálózatok és rendszerek. Műszaki Könyvkiadó, Budapest (2002).

A CLASSIFICATION CONCEPT OF CHEMICAL ENGINEERING BY EXTENDED DAMKÖHLER EQUATION

Chemical engineering is the fourth primary engineering that the big industrial production is realized by transformation of chemical composition of material. Development of chemical engineering began by G. Damköhler's works in Germany in 1930s and finished it in the USA by the end of World War II. The classical continuity equation with the members of source and conductivity was extended by G. Damköhler and in this way he was able to make a reactor from the heat exchanger. In Hungary the chemical engineering was founded and improved by two well-known professors named Pál Benedek and Antal László. They extended further the Damköhler's equation with the member of transmission and created the general transport equation of chemical engineering, called extended Damköhler equation. The extended Damköhler equation is the fundamental equation of chemical engineering, because it quite general and may concretize comfortably. A classification concept is given by the extended Damköhler equation in chemical engineering.