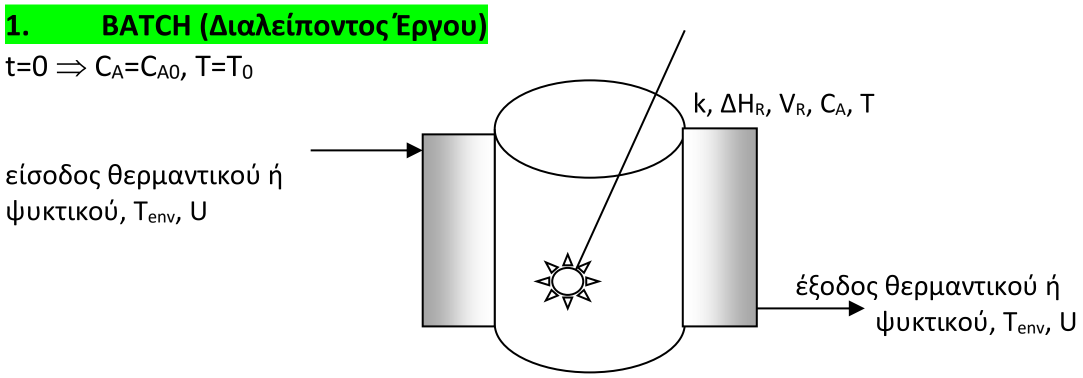
ΙΣΟΖΥΓΙΑ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ
Είσοδος-Έξοδος+Παραγωγή-Κατανάλωση=Συσώρευση

Γραμμομοριακή παροχή Α: F_A (mol/s)
Ογκομετρική παροχή: $\dot{V}$ (lt/s)
Μαζική παροχή: $\dot{m}$ (kg/s)
Πυκνότητα: ρ (kg/lt)
Μετατροπή Α: x_A (0 έως 1)
Όγκος αντιδρώντος μίγματος: V_R (lt)
Χρόνος χώρου αντιδραστήρα: τ (s)
Θερμοχωρητικότητα μίγματος: C_{Pmix} [kJ/(kg*°C)]
Θερμοτονισμός αντίδρασης (απόλυτη τιμή): $|\Delta H_R|$ (kJ/mol)
Ειδική επιφάνεια καταλύτη: S_g (m^2/kg_{cat})
Μάζα καταλύτη: m_{cat} (kg_{cat})
Πορώδες καταλυτικής κλίνης: $\varepsilon = \frac{V_R - V_{cat}}{V_R}$
Πυκνότητα καταλύτη:
Ρυθμός δράσης (m-οστής τάξης ως προς Α, απόλυτη τιμή): $|r_A| = k*C_A^m$
Σταθερά αντίδρασης 1ης τάξης δηλ. m=1:
k (s^{-1}) (ρυθμός ως προς τον όγκο του αντιδρώντος μίγματος)
k [$lt/(kg_{cat}*s)$] (ρυθμός ως προς τη μάζα καταλύτη)
Ταχύτητα ροής ρευστού σε αυλό: u (m/s)
Εγκάρσια διατομή εισόδου αυλού: S (m^2)
Παράπλευρη επιφάνεια εναλλαγής θερμότητας: A (m^2)
Συνολικός συντελεστής μεταφοράς θερμότητας: U [$kW/(°C*m^2)$]
Θερμορροή ψύξης-θέρμανσης αντιδραστήρα: $\dot{q} = U*A*(T_{env}-T)$ (kJ/s)
$F_A = F_{A0}*(1-x_A)$, $C_A = C_{A0}*(1-x_A)$, $\rho = \frac{\dot{m}}{\dot{V}}$, $\tau = \frac{V_R}{\dot{V}}$, $F_A = \dot{V}*C_A$, $\dot{V} = u*S$

(Έστω 1ης τάξης Α→Β)

1. BATCH (Διαλείποντος Έργου)

$t=0 \Rightarrow C_A = C_{A0}$, $T = T_0$



1.1. Mass Balance (Ισοζύγιο Μάζας) (mol/s):

1.1.1. Unsteady State (Μη-Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος =0, Έξοδος =0, Παραγωγή =0
Κατανάλωση = $|r_A|*V_R = k*C_{A0}*(1-x_A)*V_R$
Συσώρευση = $V_R*C_{A0}*d(1-x_A)/dt$

$-k*C_{A0}*(1-x_A)*V_R = V_R*C_{A0}*d(1-x_A)/dt \Rightarrow$

$-k*C_{A0}*V_R*\left(\int_0^t dt\right) = V_R*C_{A0}*\left(\int_0^{x_A} \frac{1}{1-x_A} d(1-x_A)\right) \Rightarrow$

$1-x_A=e^{-k*t} \Rightarrow x_A=1-e^{-k*t}$

1.1.2. Steady State (Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος =0, Έξοδος =0, Παραγωγή =0
Κατανάλωση = $|r_A|*V_R=k*C_{A0}*(1-x_A)*V_R$
Συσώρευση = 0

Κατανάλωση = $|r_A|*V_R = 0 \Rightarrow |r_A| = 0$
(ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ ΜΗΔΕΝΙΚΟΥ ΡΥΘΜΟΥ. ΔΕΝ ΞΕΚΙΝΗΣΕ Η ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ)

1.2. Energy Balance (Ισοζύγιο Ενέργειας) (kJ/s):

1.2.1. Πολυτροπικός

1.2.1.1. Unsteady State (Μη-Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος - Έξοδος = $\dot{q}$, Παραγωγή - Κατανάλωση = =$\pm|\Delta H_R|*|r_A|*V_R$
Συσώρευση =$m*C_P*dT/dt$

$\dot{q}+(\pm|\Delta H_R|)*|r_A|*V_R= m*C_P*dT/dt \Rightarrow U*A*(T_{env}-T)+(\pm|\Delta H_R|)*k*C_{A0}*(1-x_A)*V_R= m*C_P*dT/dt \Rightarrow$

$\frac{dT}{dt}-\frac{U*A}{m*C_P}*(T_{env}-T)=\frac{\pm|\Delta HR|*k*C_{A0}*V_R}{m*C_P}*e^{-k*t}$ (ΓΡΑΜΜΙΚΗ 1ης ΤΑΞΗΣ)$\Rightarrow$

$$T(t)=T_{env}*\left(1-e^{\frac{U*A}{m*C_P}*t}\right)+T_0*e^{\frac{U*A}{m*C_P}*t}+\frac{\pm|\Delta H_R|*k*C_{A0}*V_R}{U*A-k*m*C_P}*\left(e^{\left(2*\frac{U*A}{m*C_P}-k\right)*t}-e^{\frac{U*A}{m*C_P}*t}\right)$$

Για σταθερή μέση θερμοροή ψύξης-θέρμανσης $\dot{q}$ ισχύει:
$T=T_0+\{\dot{q}/(m*C_P)\}*t+\{[(\pm|\Delta H_R|)*V_R*C_{A0}]/(m*C_P)\}*e^{-k*t}$

1.2.1.2. Steady State (Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος - Έξοδος = $\dot{q}$, Παραγωγή - Κατανάλωση = $\pm|\Delta H_R|*|r_A|*V_R$
Συσώρευση =0

$\dot{q}+(\pm|\Delta H_R|)*|r_A|*V_R= 0 \Rightarrow U*A*(T_{env}-T) + (\pm|\Delta H_R|)*k*V_R*C_{A0}*(1-x_A) = 0 \Rightarrow$

$$T=T_{env}+\frac{(\pm|\Delta H_R|)*k*C_{A0}*V_R}{U*A}*e^{-k*t}$$

1.2.2. Αδιαβατικός

1.2.2.1 Unsteady State (Μη-Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος =0, Έξοδος =0, Παραγωγή - Κατανάλωση = $\pm|\Delta H_R|*|r_A|*V_R$
Συσώρευση =$m*C_P*dT/dt$

$(\pm|\Delta H_R|)*|r_A|*V_R= m*C_P*dT/dt \Rightarrow$

$T=T_0+\{[(\pm|\Delta H_R|)*V_R*C_{A0}]/(m*C_P)\}*e^{-k*t}$

1.2.2.2. Steady State (Μόνιμες Συνθήκες)

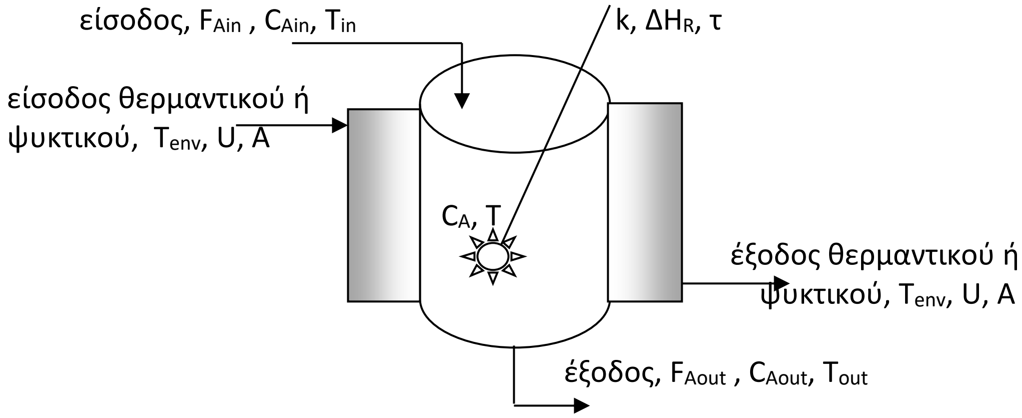
Είσοδος =0, Έξοδος = 0, Παραγωγή - Κατανάλωση = $\pm|\Delta H_R|*|r_A|*V_R$
Συσώρευση =0

$\pm\ |\Delta H_R|*|r_A|*V_R = 0 \Rightarrow |\Delta H_R| = 0$

(ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ ΜΗΔΕΝΙΚΟΥ ΘΕΡΜΟΤΟΝΙΣΜΟΥ)
(ΟΥΤΕ ΕΞΩΘΕΡΜΗ ΟΥΤΕ ΕΝΔΟΘΕΡΜΗ)

2. CSTR (Πλήρους Ανάδευσης)

Για πλήρη ανάδευση ισχύει ότι $C_{Aout}=C_A$ και $T_{out}=T$



2.1. Mass Balance (Ισοζύγιο Μάζας) (mol/s):

2.1.1 Unsteady State (Μη-Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος $=F_{Ain}$, Έξοδος $=F_{Aout}$, Παραγωγή =0
Κατανάλωση = $|r_A|*V_R=k*C_A*V_R$
Συσώρευση = V_R*dC_A/dt

$F_{Ain}-F_{Aout}-k*C_A*V_R= V_R*dC_A/dt \Rightarrow$

$F_{Ain}-F_{Aout}-k*C_{Ain}*(1-x_A)*V_R= V_R*C_{Ain}*d(1-x_A)/dt \Rightarrow$

$\dot{V}*C_{Ain}-\dot{V}*C_{Aout} -k*C_{Ain}*(1-x_A)*V_R= V_R*C_{Ain}*d(1-x_A)/dt \Rightarrow$

$\dot{V}*C_{Ain}-\dot{V}*C_{Ain} (1-x_A)-k*C_{Ain}*(1-x_A)*V_R= V_R*C_{Ain}*d(1-x_A)/dt \Rightarrow$

$\dot{V}-\dot{V} (1-x_A)-k*V_R * (1-x_A) = V_R*d(1-x_A)/dt \Rightarrow$

$\dot{V}/ V_R -\dot{V}/ V_R (1-x_A)-k* (1-x_A) =d(1-x_A)/dt \Rightarrow$

$1/\tau-(1/\tau + k)*(1-x_A)= d(1-x_A)/dt \Rightarrow -(1/\tau + k)*t=\ln[1/\tau - (1/\tau + k)*(1-x_A)] \Rightarrow$

$$1-x_A=\frac{\tau*e^{-(1+k*\tau)*\left(\frac{t}{\tau}\right)}-1}{1+k*\tau} \Rightarrow x_A=1+\frac{\tau*e^{-(1+k*\tau)*\left(\frac{t}{\tau}\right)}-1}{1+k*\tau}$$

2.1.1. Steady State (Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος $=F_{Ain}$, Έξοδος $=F_{Aout}$, Παραγωγή =0
Κατανάλωση = $|r_A|*V_R=k*C_A*V_R$
Συσώρευση = 0

$F_{Ain}-F_{Aout}-k*C_A*V_R=0 \Rightarrow 1/\tau-(1/\tau + k)*(1-x_A)=0 \Rightarrow$

$(1-x_A) = 1/(1+k*\tau) \Rightarrow x_A = k*\tau/(1+k*\tau)$

2.2. Energy Balance (Ισοζύγιο Ενέργειας) (kJ/s):

2.2.1. Πολυτροπικός

2.2.1.1. Unsteady State (Μη-Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος - Έξοδος = $\dot{q} + \dot{m}_{mix}*C_{Pmix}*(T_{in} - T_{out})$,
Παραγωγή - Κατανάλωση = $\pm|\Delta H_R|*|r_A|*V_R$
Συσώρευση = $V_R*\rho_{mix}*C_{Pmix}*dT/dt$
Πλήρης ανάδευση $T_{out}=T$

$$\dot{q} + \dot{m}_{mix}*C_{Pmix}*(T_{in} - T_{out}) + (\pm|\Delta H_R|)*|r_A|*V_R = V_R*\rho_{mix}*C_{Pmix}*dT/dt \Rightarrow$$

$$U*A*(T_{env}-T) + \dot{m}_{mix}*C_{Pmix}*(T_{in} - T_{out}) + (\pm|\Delta H_R|)*k*V_R*C_{Ain}*(1-x_A) = V_R*\rho_{mix}*C_{Pmix}*dT/dt \Rightarrow$$

C_1 $=U*A/(V_R*\rho_{mix}*C_{Pmix})$

C_2 $=\dot{m}_{mix}*C_{Pmix}/(V_R*\rho_{mix}*C_{Pmix})$

C_3 $=(\pm|\Delta H_R|)*k*C_{Ain}/(\rho_{mix}*C_{Pmix})$

C_4 $=(U*A+\dot{m}_{mix}*C_{Pmix})/(V_R*\rho_{mix}*C_{Pmix})$

C_5 $=(\pm|\Delta H_R|)*k*C_{Ain}*\tau/[\rho_{mix}*C_{Pmix}*(1+k*\tau)]$

C_6 $=\frac{U*A*T_{env}+\dot{m}_{mix}*C_{Pmix}*T_{in}-(\pm|\Delta H_R|)*k*V_R*C_{Ain}*(1+k*\tau)^{-1}}{V_R*\rho_{mix}*C_{Pmix}}$

(α) Για $dC_A/dt = 0$ (steady state μάζας) $\Rightarrow (1-x_A) = 1/(1+k*\tau)$

Άρα:

$$C_1*(T_{env}-T) + C_2*(T_{in} - T) + C_3/(1+k*\tau) = dT/dt \Rightarrow \int_0^t dt = -\frac{1}{C_1+C_2} * \int_{T_{in}}^{T} \frac{d\left[C_1*(T_{env}-T)+C_2*(T_{in}-T)+\frac{C_3}{1+k*\tau}\right]}{C_1*(T_{env}-T)+C_2*(T_{in}-T)+\frac{C_3}{1+k*\tau}} \Rightarrow$$

$$T = \frac{C_1 * T_{env} + C_2 * T_{in} + \frac{C_3}{1+k*\tau} - \left[C_1*(T_{env} - T_{in}) + \frac{C_3}{1+k*\tau}\right] * e^{-(C_1+C_2)*t}}{C_1 + C_2}$$

(b) Για $dC_A/dt \neq 0$ (unsteady state μάζας) $\Rightarrow (1-x_A) = \frac{\tau*e^{-(1+k*\tau)*\left(\frac{t}{\tau}\right)}-1}{1+k*\tau}$

$$\frac{dT}{dt} + C_4 * T = C_5 * e^{-(1+k*\tau)*\frac{t}{\tau}} + C_6$$

(ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΜΗ ΟΜΟΓΕΝΗΣ 1ης ΤΑΞΗΣ)

$$T = \left(T_{in} - \frac{C_5 * \tau}{C_4 * \tau - (1 + k * \tau)} + \frac{C_6}{C_4}\right) * e^{-C_4*t} + \frac{C_5 * \tau}{C_4 * \tau - (1 + k * \tau)} e^{-(1+k*\tau)*\frac{t}{\tau}} + \frac{C_6}{C_4}$$

2.2.1.2. Steady State (Μόνιμες Συνθήκες)

Είσοδος - Έξοδος = $\dot{q} + \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * (T_{in} - T_{out})$,
Παραγωγή - Κατανάλωση = ± |ΔH_R|*|r_A|*V_R
Συσώρευση = 0

$\dot{q} + \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * (T_{in} - T_{out})$ +(±|ΔH_R|)*|r_A|*V_R = 0 ⇒
U*A*(T_{env}-T) +$\dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * (T_{in} - T)$ + (±|ΔH_R|)*k*V_R *C_{Ain}*(1-x_A) = 0 ⇒
(U*A*T_{env}+$\dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * T_{in}$)-T*(U*A+$\dot{m}_{mix} * C_{Pmix}$) +(±|$\Delta H_R$|)*k*$V_R$ *C_{Ain}*(1-x_A)=0

(α) Για dC_A/dt = 0 <u>(steady state μάζας)</u> ⇒ (1-x_A)= 1/(1+k*τ)
Άρα

$$T = \frac{U * A * T_{env} + \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * T_{in} + (\pm|\Delta H_R|) * k * V_R * C_{Ain} * \frac{1}{1 + k * \tau}}{U * A + \dot{m}_{mix} * C_{Pmix}}$$

(b) Για $dC_A/dt \neq 0$ <u>(unsteady state μάζας)</u> ⇒ (1-x_A)= $\frac{\tau * e^{-(1+k*\tau)*\left(\frac{t}{\tau}\right)} - 1}{1+k*\tau}$

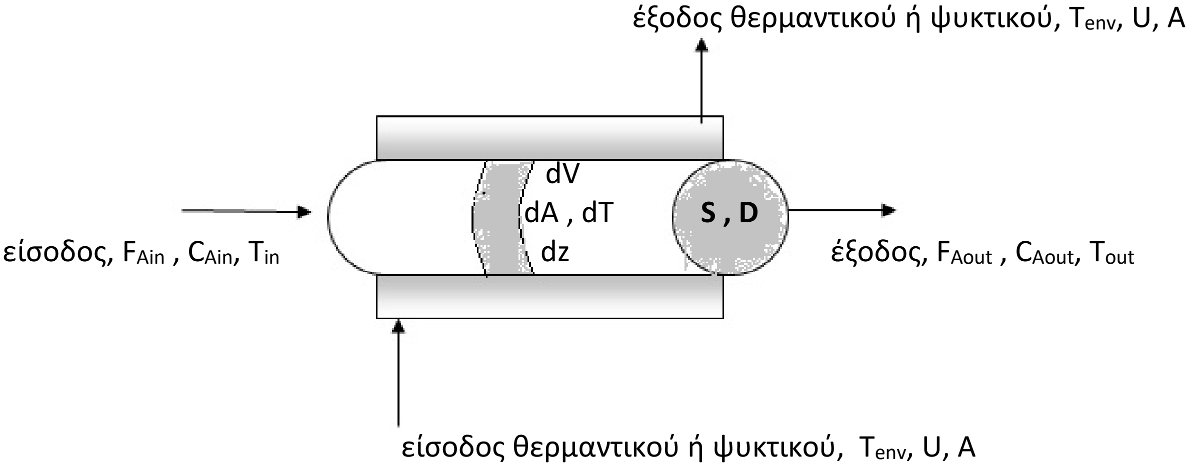
$$T = \frac{U * A * T_{env} + \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * T_{in} + (\pm|\Delta H_R|) * k * V_R * C_{Ain} * \frac{\tau * e^{-(1+k*\tau)*\left(\frac{t}{\tau}\right)} - 1}{1 + k * \tau}}{U * A + \dot{m}_{mix} * C_{Pmix}}$$

(Η ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΧΡΟΝΟ ΔΕΙΧΝΕΙ ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΜΕ ΤΟ ΧΡΟΝΟ ΚΑΙ ΑΡΑ ΔΕΝ ΥΠΑΡΧΕΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΟ st.st. ΧΩΡΙΣ ΝΑ ΥΠΑΧΕΙ st.st. ΜΑΖΙΚΗΣ ΡΟΗΣ)

3. PFR (Plug Flow-Εμβολικής Ροής)

Για ένα διαφορικό όγκο ελέγχου dV:

ΘΕΩΡΟΥΜΕ ΜΟΝΙΜΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ (STEADY STATE) ΜΑΖΙΚΗΣ ΡΟΣ (dC_A/dt=0) ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ (dT/dt=0)



3.1. Mass Balance (Ισοζύγιο Μάζας) (mol/s):

3.1.1. Διαφορική θεώρηση ως προς τον όγκο

F_{Ain}*dx=|r_A|*dV⇒$F_{Ain} * dx = k * C_{Ain} * (1 - x) * dV$⇒$\int_0^{x_{out}} \frac{dx}{1-x} = \frac{k*C_{Ain}}{F_{Ain}} \int_0^{V_R} dV$⇒

$x_{out} = 1 - e^{-\frac{k*C_{Ain}}{F_{Ain}}*V_R}$ ⇒$x_{out} = 1 - e^{-k*\tau}$

3.1.2. Διαφορική θεώρηση ως προς τη μάζα καταλύτη

F_{Ain}*dx=|r'_A|*$dm_c$$\Rightarrow F_{Ain} * dx = k' * C_{Ain} * (1-x) * dm_c \Rightarrow \int_0^{x_{out}} \frac{dx}{1-x} = \frac{k' * C_{Ain}}{F_{Ain}} \int_0^{m_{cat}} dm_c \Rightarrow$

$$x_{out} = 1 - e^{-\frac{k' * C_{Ain}}{F_{Ain}} * m_{cat}}$$

3.1.3. Διαφορική θεώρηση ως προς το μήκος αντιδραστήρα (διάμετρος D_R σταθερή)

F_{Ain}*dx=|r_A|*dV$\Rightarrow F_{Ain} * dx = k * C_{Ain} * (1-x) * \frac{\pi * D_R^2}{4} * dz \Rightarrow \int_0^{x_{out}} \frac{dx}{1-x} = \frac{k * C_{Ain}}{F_{Ain}} * \frac{\pi * D_R^2}{4} \int_0^{L_R} dz \Rightarrow$

$$x_{out} = 1 - e^{-\frac{k * C_{Ain}}{F_{Ain}} * \frac{\pi * D_R^2}{4} * L_R} \Rightarrow L_R = -\frac{4 * F_{Ain}}{\pi * k * C_{Ain} * D_R^2} * \ln(1 - x_{out})$$

Για τυχαίο μήκος z (<L_R) του αντιδραστήρα πριν την έξοδο και τυχαία μετατροπή x μέχρι εκεί (x<x_{out}) ισχύει:

$$x = 1 - e^{-\frac{k * C_{Ain}}{F_{Ain}} * \frac{\pi * D_R^2}{4} * z} \Rightarrow z = -\frac{4 * F_{Ain}}{\pi * k * C_{Ain} * D_R^2} * \ln(1 - x)$$

3.1.4. Διαφορική θεώρηση ως προς τη διάμετρο αντιδραστήρα (μήκος L_R σταθερό)

F_{Ain}*dx=|r_A|*dV$\Rightarrow F_{Ain} * dx = k * C_{Ain} * (1-x) * \frac{\pi * L_R}{2} * D * dD \Rightarrow \int_0^{x_{out}} \frac{dx}{1-x} = \frac{k * C_{Ain}}{F_{Ain}} * \frac{\pi * L_R}{2} \int_0^{D_R} D dD \Rightarrow$

$$x_{out} = 1 - e^{-\frac{k * C_{Ain}}{F_{Ain}} * \frac{\pi * D_R^2}{4} * L_R} \Rightarrow D_R = \sqrt{-\frac{4 * F_{Ain}}{\pi * k * C_{Ain} * L_R} * \ln(1 - x_{out})}$$

3.2. Energy Balance (Ισοζύγιο Ενέργειας) (kJ/s):

3.2.1. Πολυτροπικός

Διαφορική θεώρηση ως προς τον όγκο

U*(T_{env}-T)*dA+F_{Ain}*(± |ΔH_R|)*dx=$\dot{m}_{mix} * C_{Pmix}$*dT$\Rightarrow$

U*(T_{env}-T)*π*D_R*dz+F_{Ain}*(± |ΔH_R|)*dx=$\dot{m}_{mix} * C_{Pmix}$*dT$\Rightarrow$

$$U * (T_{env} - T) * \frac{4 * F_{Ain}}{k * C_{Ain} * D_R} * \frac{dx}{1-x} + F_{Ain} * (\pm|\Delta H_R|) * \mathrm{dx} = \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * \mathrm{dT}$$

(ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΗ ΠΡΩΤΗΣ ΤΑΞΗΣ- ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ)

3.2.1.1 Ισοθερμοκρασιακή λειτουργία

T_{in}=T_{out}=T=constant$\Rightarrow$dT=0

Από το ισοζύγιο μάζας έχουμε:

$$dz = \frac{4 * F_{Ain}}{\pi * k * C_{Ain} * D_R^2} * \frac{dx}{1-x}$$

Άρα:

$$\mathrm{U} * (\mathrm{T_{env}} - \mathrm{T_{in}}) * \frac{4 * \mathrm{F_{Ain}}}{k * \mathrm{C_{Ain}} * \mathrm{D_R}} * \int_0^{\mathrm{x_{out}}} \frac{\mathrm{dx}}{1-\mathrm{x}} + \mathrm{F_{Ain}} * (\pm|\Delta \mathrm{H_R}|) * \int_0^{\mathrm{x_{out}}} \mathrm{dx} = 0 \Rightarrow$$

$$(\pm|\Delta \mathrm{H_R}|) * x_{out} = \mathrm{U} * (\mathrm{T_{env}} - \mathrm{T_{in}}) * \frac{4}{\mathrm{k} * \mathrm{C_{Ain}} * \mathrm{D_R}} * \ln(1 - x_{out})$$

3.2.2. Αδιαβατικός

$$F_{Ain} * (\pm|\Delta H_R|) * \int_0^{x_{out}} \mathrm{dx} = \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * \int_{T_{in}}^{T_{out}} dT \Rightarrow$$
$$F_{Ain} * (\pm|\Delta H_R|) * x_{out} = \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * (T_{out} - T_{in})$$

Για τυχαίο μήκος z ($<L_R$) του αντιδραστήρα πριν την έξοδο και τυχαία μετατροπή x μέχρι εκεί ($x<x_{out}$) ισχύει:

$$F_{Ain} * (\pm|\Delta H_R|) * \mathrm{x} = \dot{m}_{mix} * C_{Pmix} * (T - T_{in})$$

ΛΥΜΕΝΑ ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ

1. Έστω η αντίδραση Α→Β με κινητική πρώτης τάξης. Για C_A=1 mol/lt η ταχύτητα της δράσης είναι 0.2 mol/(lt*s). Ποιος θα είναι ο ρυθμός της δράσης για C_A =10 mol/lt ;

ΛΥΣΗ

Αφού είναι πρώτης τάξης ισχύει $r_A=k*C_A$→$k=r_A/C_A$ (Υπολογισμός k για C_A=1 mol/lt)
Για ίδιες συνθήκες θερμοκρασίας-πίεσης k=σταθερό. Άρα $r_A=k*C_A$ (Υπολογισμός r_A για C_A=10 mol/lt)

2. Ένα υγρό Α διασπάται (Α→Β) με κινητική πρώτης τάξης σε αντιδραστήρα διαλείποντος έργου (batch) με μετατροπή 50% σε χρόνο 5min. Πόσος χρόνος θα απαιτηθεί για να έχουμε μετατροπή 75% ;

ΛΥΣΗ

Αφού είναι πρώτης τάξης ισχύει $r_A=k*C_A$. Επίσης ισχύει ότι $C_A=C_{A0}*(1-x_A)$. Ισοζύγιο μάζας για batch αντιδραστήρα:

$$r_A*V_R=V_R*\frac{dC_A}{dt}\Rightarrow k*C_A=\frac{dC_A}{dt}\Rightarrow k*C_{A0}*(1-x_A)=C_{A0}*\frac{d(1-x_A)}{dt}\Rightarrow k*dt=\frac{d(1-x_A)}{1-x_A}\Rightarrow$$

$$k*\int_0^t dt=\int_0^{x_A}\frac{d(1-x_A)}{1-x_A}\Rightarrow k*t=\ln(1-x_A)$$

Επιλύουμε ως προς k για x_A=0.5 και t=5 min. Επειδή k=σταθερό επιλύουμε ξανά ως προς t για το k που υπολογίσαμε και για x_A=0.75.

3. Επαναλάβετε την άσκηση 2 για κινητική δευτέρας τάξης και C_{A0}=10 mol/lt.

ΛΥΣΗ

Αφού είναι δευτέρας τάξης ισχύει $r_A=k*C_A^2$. Επίσης ισχύει ότι $C_A=C_{A0}*(1-x_A)$. Ισοζύγιο μάζας για batch αντιδραστήρα:

$$r_A*V_R=V_R*\frac{dC_A}{dt}\Rightarrow k*C_A^2=\frac{dC_A}{dt}\Rightarrow k*C_{A0}^2*(1-x_A)^2=C_{A0}*\frac{d(1-x_A)}{dt}\Rightarrow k*C_{A0}*dt=\frac{d(1-x_A)}{(1-x_A)^2}\Rightarrow$$

$$k*C_{A0}*\int_0^t dt=\int_0^{x_A}\frac{d(1-x_A)}{(1-x_A)^2}\Rightarrow k*C_{A0}*t=-\frac{1}{1-x_A}+1$$

Επιλύουμε ως προς k για x_A=0.5 και t=5 min. Επειδή k=σταθερό επιλύουμε ξανά ως προς t για το k που υπολογίσαμε και για x_A=0.75.

4. Επαναλάβετε την άσκηση 2 για κινητική τάξης ½ και C_{A0}=10 mol/lt.

ΛΥΣΗ

Αφού είναι τάξης ½ ισχύει $r_A=k*C_A^{1/2}$. Επίσης ισχύει ότι $C_A=C_{A0}*(1-x_A)$. Ισοζύγιο μάζας για batch αντιδραστήρα:

$$r_A*V_R=V_R*\frac{dC_A}{dt}\Rightarrow k*C_A^{1/2}=\frac{dC_A}{dt}\Rightarrow k*C_{A0}^{1/2}*(1-x_A)^{1/2}=C_{A0}*\frac{d(1-x_A)}{dt}\Rightarrow$$

$$k*C_{A0}^{-1/2}*dt=\frac{d(1-x_A)}{(1-x_A)^{1/2}}\Rightarrow k*C_{A0}^{-1/2}*\int_0^t dt=\int_0^{x_A}\frac{d(1-x_A)}{(1-x_A)^{1/2}}\Rightarrow k*C_{A0}^{-1/2}*t=2*x_A^{1/2}$$

Επιλύουμε ως προς k για x_A=0.5 και t=5 min. Επειδή k=σταθερό επιλύουμε ξανά ως προς t για το k που υπολογίσαμε και για x_A=0.75.

5. Η αντίδραση Α→Β είναι πρώτης τάξης και διεξάγεται σε αντιδραστήρα συνεχούς έργου πλήρους ανάμειξης (CSTR) όγκου V_R=50 lt. Τα αιωρούμενα στερεά καταλυτικά σωματίδια θεωρούνται σφαιρικά με πυκνότητα ρ_{cat}=0.8 g/cm^3_{cat}. Η ποσότητα καταλύτη στον αντιδραστήρα είναι m_{cat}=1 kg. Η τροφοδοσία του αντιδραστήρα γίνεται με υγρό διάλυμα Α με αρχική συγκέντρωση C_{A0}=20 mol/lt. Στην έξοδο του αντιδραστήρα η συγκέντρωση του Α είναι C_A=15 mol/lt. Ο χρόνος χώρου του αντιδραστήρα είναι τ=50 min. Να υπολογιστεί η ειδική ταχύτητα της δράσης για ρυθμό εκφρασμένο ανά μονάδα όγκου αντιδραστήρα (molA/($lt_{reactor}$*min) και ανά μονάδα όγκου καταλύτη (molA/($lt_{cat.}$*min).

ΛΥΣΗ

Αφού είναι πρώτης τάξης ισχύει r_A=k*C_A. Επίσης ισχύει ότι C_A=C_{A0}*(1-x_A), x_A=(C_{A0}-C_A)/C_{A0} και ότι τ=V_R/Q→Q=V_R/τ.

Ισοζύγιο μάζας για CSTR αντιδραστήρα για ρυθμό εκφρασμένο ανά μονάδα όγκου αντιδραστήρα σε μόνιμες συνθήκες (steady state):

$$Q*C_{A0}-Q*C_A-r_A*V_R=0 \Rightarrow Q*C_{A0}-Q*C_A-k*C_A*V_R=0 \Rightarrow$$

$$Q*C_{A0}-Q*C_{A0}*(1-x_A)-k*C_{A0}*(1-x_A)*V_R=0 \Rightarrow Q*x_A-k*(1-x_A)*V_R=0 \Rightarrow$$

$$k=\frac{Q*x_A}{(1-x_A)*V_R}$$

Ο όγκος καταλύτη είναι ίσος με V_{cat}=m_{cat}/ρ_{cat}.

Ισοζύγιο μάζας για CSTR αντιδραστήρα για ρυθμό εκφρασμένο ανά μονάδα όγκου καταλύτη σε μόνιμες συνθήκες (steady state):

$$Q*C_{A0}-Q*C_A-r_A*V_{cat}=0 \Rightarrow Q*C_{A0}-Q*C_A-k*C_A*V_{cat}=0 \Rightarrow$$

$$Q*C_{A0}-Q*C_{A0}*(1-x_A)-k*C_{A0}*(1-x_A)*V_{cat}=0 \Rightarrow Q*x_A-k*(1-x_A)*V_{cat}=0 \Rightarrow$$

$$k=\frac{Q*x_A}{(1-x_A)*V_{cat}}$$

Σημειώνεται ότι οι τιμές του k διαφέρουν στις δυο περιπτώσεις επειδή στην πρώτη περίπτωση και για πρώτης τάξης αντίδραση οι μονάδες του k είναι min^{-1} ενώ στη δεύτερη και για πρώτης πάλι τάξης αντίδραση οι μονάδες του k είναι min^{-1}*$lt_{reactor}$/cm^3_{cat}.

6. Βιομηχανικός αυλωτός αντιδραστήρας όγκου V_R=50 m^3 λειτουργεί με καταλύτη σε σταθερή κλίνη και η αντίδραση Α→Β ακολουθεί κινητική πρώτης τάξης. Στην έξοδο επιτυγχάνεται μετατροπή του Α κατά 95%. Η ειδική ταχύτητα της δράσης είναι 8 m^3/(h*kg_{cat}). Το πορώδες της κλίνης είναι ε=0.4 και η πυκνότητα του καταλύτη ρ_{cat}=1.4 g/cm^3_{cat}. Να υπολογισθεί η ογκομετρική παροχή τροφοδοσίας.

ΛΥΣΗ

Αφού είναι πρώτης τάξης ισχύει r_A=k*C_A. Επίσης x_A=0.95. Με βάση τον ορισμό του πορώδους ισχύει: ε=(V_R-V_{cat})/V_R→V_{cat}=V_R*(1-ε). Άρα η συνολική μάζα καταλύτη είναι m_{cat0}=ρ_{cat}*V_{cat}.

Από τις μονάδες του k καταλαβαίνουμε ότι ο ρυθμός εκφράζεται σε molA/(h*kg_{cat}).

Επίσης ισχύει ότι F_A=Q*C_A.

Ισοζύγιο μάζας για αντιδραστήρα εμβολικής ροής (Plug Flow) για ρυθμό εκφρασμένο ανά μονάδα μάζας καταλύτη σε μόνιμες συνθήκες (steady state):

$$F_{A0}*dx=r_A*dm_{cat} \Rightarrow F_{A0}*dx=k*C_A*dm_{cat} \Rightarrow F_{A0}*dx=k*C_{A0}*(1-x)*dm_{cat} \Rightarrow$$

$$F_{A0}*\frac{dx}{1-x}=k*C_{A0}*dm_{cat} \Rightarrow Q*C_{A0}*\int_0^{x_A}\frac{dx}{1-x}=k*C_{A0}*\int_0^{m_{cat0}}dm_{cat} \Rightarrow Q*[-\ln(1-x_A)]=k*m_{cat0} \Rightarrow$$

$$Q=\frac{k*m_{cat0}}{-\ln(1-x_A)}$$

Σημειώνεται ότι το Ισοζύγιο μάζας για ρυθμό εκφρασμένο ανά μονάδα όγκου αντιδραστήρα (άρα k σε μονάδες h^{-1}) σε μόνιμες συνθήκες (steady state) είναι:

$$F_{A0} * dx = r_A * dV_R \Rightarrow F_{A0} * dx = k * C_A * dV_R \Rightarrow F_{A0} * dx = k * C_{A0} * (1-x) * dV_R \Rightarrow$$

$$F_{A0} * \frac{dx}{1-x} = k * C_{A0} * dV_R \Rightarrow Q * C_{A0} * \int_0^{x_A} \frac{dx}{1-x} = k * C_{A0} * \int_0^{V_{R0}} dV_R \Rightarrow Q * [-\ln(1-x_A)] = k * V_{R0} \Rightarrow$$

$$Q = \frac{k * V_{R0}}{-\ln(1-x_A)}$$

1. Αδιαβατικός αντιδραστήρας εμβολικής ροής χρησιμοποιείται για τη διεξαγωγή της εξώθερμης καταλυτικής δράσης:

$$A \rightarrow B$$

Όπως προέκυψε από πειράματα σε αντιδραστήρα διαλείποντος έργου η αντίδραση είναι πρώτης τάξης, ενώ ο θερμοτονισμός της αντίδρασης είναι ΔH_R.

Η υγρή τροφοδοσία, πυκνότητας d_L, περιέχει το Α σε συγκέντρωση $C_{A,IN}$ και εισέρχεται με ογκομετρική παροχή Q_L στον αντιδραστήρα σε θερμοκρασία T_{IN}. Μέσα στον αντιδραστήρα βρίσκεται πακτωμένη καταλυτική κλίνη συνολικής μάζας m_{CAT}. Υπολογίστε τη συγκέντρωση της υγρής φάσης εξόδου σε Α, $C_{A,OUT}$, και της θερμοκρασίας εξόδου T_{out} από τον αντιδραστήρα.

Δίνονται: $Q_L = 100\dfrac{m_L^3}{h}$, $C_{A,IN} = 5\dfrac{mole}{m_L^3}$, $T_{IN} = 310^oC$, $m_{CAT} = 10 kg_{CAT}$,

k=8 $m_L^3/(kg_{cat}*h)$, , $\Delta H_R = 2.5 \cdot 10^4 \dfrac{kJ}{mole}$, $\overline{C}_{P,L} = 5\dfrac{kJ}{Kg \cdot K}$, $d_L = 870\dfrac{Kg}{m_L^3}$

ΛΥΣΗ

	A	→	B
Αρχικά	$F_{A,IN}$		-
Αντέδρασαν	$F_{A,IN}*x_{out}$		-
Παρήχθησαν	-		$F_{A,IN}*x_{out}$
Στην Έξοδο	$F_{A,IN}*(1-x_{out})$		$F_{A,IN}*x_{out}$

Ισχύει ότι $d_L = \dfrac{\dot{m}_L}{Q} \Rightarrow \dot{m}_L = d_L * Q$ και $F_{A,IN} = Q * C_{A,IN}$

Ισοζύγιο Μάζας για Εμβολική Ροή (Plug Flow)

Με βάση τις μονάδες του ειδικού ρυθμού k το ισοζύγιο γίνεται:

$$F_{A,IN} * dx = r_A * dm_{cat} \Rightarrow Q * C_{A,IN} * dx = k * C_A * dm_{cat} \Rightarrow Q * C_{A,IN} * dx = k * C_{A,IN} * (1-x) * dm_{cat} \Rightarrow$$

$$Q * dx = k * (1-x) * dm_{cat} \Rightarrow Q * \int_0^{x_{out}} \frac{dx}{1-x} = k * \int_0^{m_{CAT}} dm_{cat} \Rightarrow -\ln(1-x_A) = \frac{k}{Q} * m_{CAT} \Rightarrow x_{out} = 1 - e^{-\frac{k}{Q} * m_{CAT}}$$

$$x_{out} = 0.551$$

Άρα

$$C_{A,OUT} = C_{A,IN} * (1 - x_{out}) = 2.247 \frac{mole}{m_L^3}$$

Ισοζύγιο Ενέργειας για Εμβολική Ροή (Plug Flow):

$$U * (T_{env} - T) * dA + F_{A,IN} * |\Delta H_R| * dx = \dot{m}_L * \overline{C}_{P,L} * dT$$

Για αδιαβατική λειτουργία ισχύει:

$$F_{A,IN} * |\Delta H_R| * dx = \dot{m}_L * \overline{C}_{P,L} * dT \Rightarrow Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * \int_0^{x_{out}} dx = \dot{m}_L * \overline{C}_{P,L} * \int_{T_{IN}}^{T_{OUT}} dT \Rightarrow$$

$$Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * x_{out} = d_L * Q * \overline{C}_{P,L} * (T_{OUT} - T_{IN}) \Rightarrow T_{OUT} = \frac{C_{A,IN} * |\Delta H_R| * x_{out}}{d_L * \overline{C}_{P,L}} + T_{IN}$$

Άρα $T_{OUT} = 325.833°C$

2. **Πολυτροπικός** αυλωτός αντιδραστήρας εμβολικής ροής, διαμέτρου D_R=20 cm (=0.2m) και μήκους z, χρησιμοποιείται για τη διεξαγωγή της εξώθερμης καταλυτικής δράσης:

$$A \rightarrow B$$

Όπως προέκυψε από πειράματα σε αντιδραστήρα διαλείποντος έργου η αντίδραση είναι πρώτης τάξης, ενώ ο θερμοτονισμός της αντίδρασης είναι $\Delta H_R=2.5*10^4$ kJ/mole.
Η υγρή τροφοδοσία, πυκνότητας ρ_L=870 kg/m_L^3, περιέχει το A σε συγκέντρωση $C_{A,IN}$=5 mole/m_L^3 και εισέρχεται με ογκομετρική παροχή Q_L=100 m_L^3/h στον αντιδραστήρα σε θερμοκρασία T_{IN}=310°C. Μέσα στον αντιδραστήρα βρίσκεται πακτωμένη καταλυτική κλίνη, πορώδους ε=0.5, πυκνότητας καταλύτη ρ_{cat}=1.2 kg/lt (=0.0012kg_{cat}/m_{cat}^3) και συνολικής μάζας m_{CAT}=10 kg_{cat}. Υπολογίστε τη συγκέντρωση της υγρής φάσης εξόδου σε A, $C_{A,OUT}$, και το συντελεστή μεταφοράς θερμότητας U kJ/(m^2*h*°C) για ισοθερμοκρασιακή λειτουργία του αντιδραστήρα. Η θερμοκρασία ψυκτικού του αντιδραστήρα είναι T_{env}=25 °C.
Δίνονται: Ειδική ταχύτητα της δράσης k=8 $m_L^3/(kg_{cat}*h)$

ΛΥΣΗ

	A	→	B
Αρχικά	$F_{A,IN}$		-
Αντέδρασαν	$F_{A,IN}*x_{out}$		-
Παρήχθησαν	-		$F_{A,IN}*x_{out}$
Στην Έξοδο	$F_{A,IN}*(1-x_{out})$		$F_{A,IN}*x_{out}$

Ισχύει ότι $\rho_L = \frac{\dot{m}_L}{Q} \Rightarrow \dot{m}_L = \rho_L * Q$, $F_{A,IN} = Q * C_{A,IN}$ και $V_{cat} = V_R * (1-\varepsilon)$

Ισοζύγιο Μάζας για Εμβολική Ροή (Plug Flow)
Με βάση τις μονάδες του ειδικού ρυθμού k το ισοζύγιο γίνεται:

$$F_{A,IN} * dx = r_A * dm_{cat} \Rightarrow Q * C_{A,IN} * dx = k * C_A * dm_{cat} \Rightarrow Q * C_{A,IN} * dx = k * C_{A,IN} * (1-x) * dm_{cat} \Rightarrow$$

$$Q * dx = k * (1-x) * dm_{cat} \Rightarrow Q * \int_0^{x_{out}} \frac{dx}{1-x} = k * \int_0^{m_{CAT}} dm_{cat} \Rightarrow -\ln(1-x_A) = \frac{k}{Q} * m_{CAT} \Rightarrow x_{out} = 1 - e^{-\frac{k}{Q}*m_{CAT}}$$

$$x_{out} = 0.551$$

Άρα

$$C_{A,OUT} = C_{A,IN} * (1-x_{out}) = 2.247 \frac{mole}{m_L^3}$$

Τροποποίηση Ισοζυγίου Μάζας:

$$Q * dx = k * (1-x) * dm_{cat} \Rightarrow Q * dx = k * (1-x) * \rho_{cat} * dV_{cat} \Rightarrow$$

$$Q * dx = k * (1-x) * \rho_{cat} * (1-\varepsilon) * dV_R \Rightarrow$$

$$Q * dx = k * (1-x) * \rho_{cat} * (1-\varepsilon) * \pi * \frac{D_R^2}{4} dz \Rightarrow$$

$$dz = \frac{4 * Q}{k * (1-x) * \rho_{cat} * (1-\varepsilon) * \pi * D_R^2} * dx$$

Ισοζύγιο Ενέργειας για Εμβολική Ροή (Plug Flow):

$$U * (T_{env} - T) * dA + F_{A,IN} * |\Delta H_R| * dx = \dot{m}_L * \overline{C}_{P,L} * dT$$

$Για\ ισοθερμοκρασιακή\ λειτουργία\ ισχύει\ ότι \quad T = T_{IN} \quad και \quad dT = 0$

$Άρα$

$$U * (T_{env} - T_{IN}) * dA + Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * dx = 0 \Rightarrow$$

$$U * (T_{env} - T_{IN}) * \pi * D_R * dz + Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * dx = 0 \Rightarrow$$

$$U * (T_{env} - T_{IN}) * \pi * D_R * \frac{4 * Q}{k * (1 - x) * \rho_{cat} * (1 - \varepsilon) * \pi * D_R^2} * dx + Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * dx = 0 \Rightarrow$$

$$U * (T_{env} - T_{IN}) * \frac{4 * Q}{k * (1 - x) * \rho_{cat} * (1 - \varepsilon) * D_R} * dx + Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * dx = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{4 * U * (T_{env} - T_{IN}) * Q}{k * \rho_{cat} * (1 - \varepsilon) * D_R} * \int_0^{x_{out}} \frac{dx}{1 - x} + Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * \int_0^{x_{out}} dx = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{4 * U * (T_{env} - T_{IN}) * Q}{k * \rho_{cat} * (1 - \varepsilon) * D_R} * [-\ln(1 - x_{out})] + Q * C_{A,IN} * |\Delta H_R| * x_{out} = 0 \Rightarrow$$

$$U = \frac{C_{A,IN} * |\Delta H_R| * x_{out} * k * \rho_{cat} * (1 - \varepsilon) * D_R}{4 * (T_{env} - T_{IN}) * \ln(1 - x_{out})} \Rightarrow$$

$$U = 0.29 \frac{kJ}{m^2 * {}^\circ C * h}$$

ΧΗΜΙΚΕΣ ΚΑΙ ΒΙΟΧΗΜΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ

ΘΕΜΑ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΩΝ ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ
06/09/2010

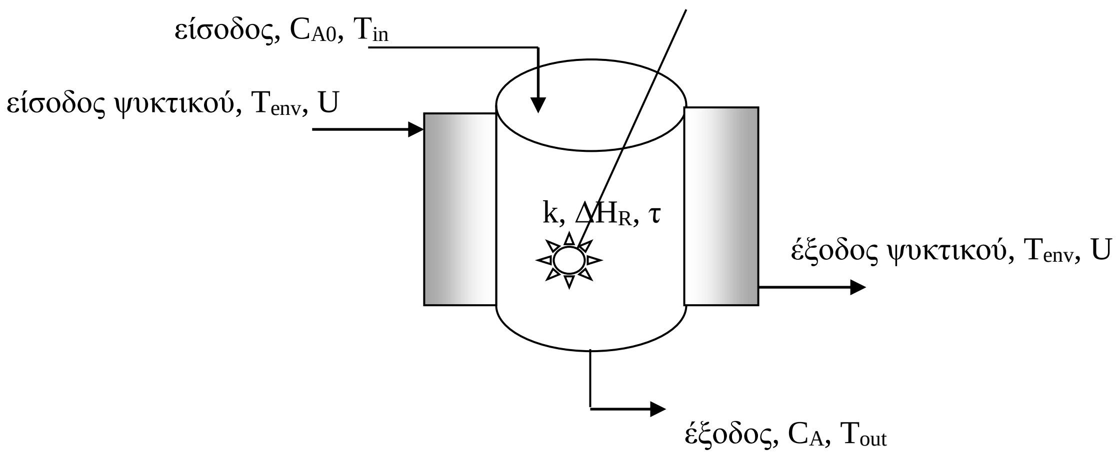
Σε βιομηχανικό κυλινδρικό αντιδραστήρα πλήρους ανάδευσης (CSTR) ακτίνας r=1m εισέρχεται αντιδρών Α και μετατρέπεται σε προϊόν Β κατά τη στοιχειώδη 1ης τάξης δράση:

A ---> B

Η συγκέντρωση εισόδου του Α είναι C_{A0} = 2 mol/lt και το αντιδρών εισέρχεται σε θερμοκρασία T_{in}=300°C. Ο χρόνος χώρου του αντιδραστήρα είναι τ=50 min. Στην παράπλευρη επιφάνεια του αντιδραστήρα ρέει ψυκτικό υγρό ώστε η διεργασία να είναι **ισοθερμοκρασιακή**. Η αντίδραση είναι **εξώθερμη** με ενθαλπία αντίδρασης ΔH_R= - 37 kJ/mol και ειδική ταχύτητα $5*10^{-4}$ s^{-1}.

1) Να υπολογιστεί ο βαθμός μετατροπής x_{out} που επιτυγχάνεται στο συγκεκριμένο αντιδραστήρα **(θεωρείστε μόνιμες συνθήκες μαζικής ροής)**.

2) Να υπολογιστεί η θερμοκρασία T_{env} του ψυκτικού μέσου που απαιτείται για να λειτουργεί ο αντιδραστήρας **ισοθερμοκρασιακά** αν ο συντελεστής μεταφοράς θερμότητας στην παράπλευρη επιφάνεια είναι U=25 W/(m²*°C).



ΛΥΣΗ

1) Steady State (Μόνιμες Συνθήκες) Μαζικής Ροής

Είσοδος $=F_{Ain}$, Έξοδος $=F_{Aout}$, Παραγωγή =0
Κατανάλωση = $|r_A| * V_R = k * C_A * V_R$
Συσώρευση = 0

$F_{Ain} - F_{Aout} - k*C_{Ain}*(1-x_A)*V_R = 0 \Rightarrow \dot{V}*C_{Ain} - \dot{V}*C_{Aout} - k*C_{Ain}*(1-x_A)*V_R = 0 \Rightarrow$

$\dot{V}*C_{Ain} - \dot{V}*C_{Ain}(1-x_A) - k*C_{Ain}*(1-x_A)*V_R = 0 \Rightarrow \dot{V} - \dot{V}(1-x_A) - k*V_R*(1-x_A) = 0 \Rightarrow$

$\dot{V}/V_R - \dot{V}/V_R(1-x_A) - k*(1-x_A) = 0 \Rightarrow 1/\tau - (1/\tau + k)*(1-x_A) = 0 \Rightarrow (1-x_A) = 1/(1+k*\tau) \Rightarrow$

$x_A = k*\tau/(1+k*\tau) \Rightarrow x_A = [5*10^{-4}\ s^{-1}*(50*60)\ s]/\{1+[5*10^{-4}\ s^{-1}*(50*60)\ s]\} \Rightarrow$

$X_A = 1.5/2.5 = 0.6$ (60% μετατροπή).

=

2) Steady State (Μόνιμες Συνθήκες) θερμοκρασίας (Ισοθερμοκρασιακό): Πολυτροπικός, Steady State (Μόνιμες Συνθήκες) Μαζικής Ροής

$\dot{q} + \dot{m}_{mix}*C_{Pmix}*(T_{in} - T_{out}) + |\Delta H_R| * |r_A| * V_R = \dot{m}*C_P*dT/dt \Rightarrow$

Ισοθερμοκρασιακά: $T_{in} = T_{out} = T$
Είσοδος - Έξοδος = $\dot{q} + \dot{m}_{mix}*C_{Pmix}*(T_{in} - T_{out}) = \dot{q} + 0$
Παραγωγή - Κατανάλωση = $+|\Delta H_R| * |r_A| * V_R$ (Εξώθερμη)
Συσώρευση = 0
Επιφάνεια εναλλαγής θερμότητας: $A = 2\pi*r*L$
Όγκος αντιδρώντος μίγματος (=όγκο αντιδραστήρα): $V_R = \pi*r^2*L$
Θερμοροή ψύξης: $\dot{q} = U*A*\Delta T = U*A*(T_{env} - T)$

$(\dot{q} + |\Delta H_R| * |r_A| * V_R = 0 \Rightarrow \dot{q} = -|\Delta H_R| * |r_A| * V_R \Rightarrow$

$U*2\pi*r*L*(T_{env} - T) = -|\Delta H_R| * k*C_{A0}*(1-x_A)*\pi*r^2*L \Rightarrow$

$T_{env} = T - |\Delta H_R| * k*C_{A0}*(1-x_A)*r/(2*U*) \Rightarrow$

$T_{env} = 300°C + 37000\ (J/mol)*5*10^{-4}\ (s^{-1})*2000\ (mol/m^3)*(1-0.6)*1\ (m)/(2*25)$
$[W/(m^2*°C)]$

$\Rightarrow T_{env} = 4°C$

ΧΗΜΙΚΕΣ ΚΑΙ ΒΙΟΧΗΜΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ

Πρώτη πρόοδος (12-01-2010)

Διάρκεια εξέτασης 2 ώρες

Θέμα

Σχεδιάζεται βιομηχανικός αυλωτός αντιδραστήρας (Plug Flow) για την μετατροπή παροχής Q=200 lt/min αντιδρώντος A κατά την αντίδραση:

$$A \rightarrow B$$

Η αντίδραση είναι πρώτης ($1^{ης}$) τάξης ως προς A και από πειράματα που έγιναν στις ίδιες συνθήκες σε εργαστηριακή διάταξη διαλείποντος έργου (Batch) βρέθηκε ότι η ειδική ταχύτητα της δράσης είναι $6*10^{-4}$ $m^3/(min*kg_{cat})$. Το πορώδες της καταλυτικής κλίνης είναι ε=0.4 και η πυκνότητα του καταλύτη $\rho_{cat}=1.4$ g_{cat}/cm^3_{cat}. Να υπολογιστεί ο χρόνος χώρου αντιδραστήρα (τ) προκειμένου να είναι εφικτή η μετατροπή του A κατά 85%.

ΛΥΣΗ

Δεδομένα σε μονάδες SI:

$Q=200$ lt/min$=(200/60)*10^{-3}$ $m^3/s=3.3333*10^{-3}$ m^3/s

$k=6*10^{-4}$ $m^3/(min*kg_{cat})=(6/60)*10^{-4}$ $m^3/(s*kg_{cat})=10^{-5}$ $m^3/(s*kg_{cat})$

$\rho_{cat}=1.4$ $g_{cat}/cm^3_{cat}=1.4$ $kg_{cat}/lt_{cat}=1.4*10^3$ kg_{cat}/m^3_{cat}

ε=0.4

$x_A=0.85$

Ισχύει ότι $C_A=C_{A0}*(1-x)$

Για αντίδραση $1^{ης}$ τάξης ισχύει ότι:

$r_A=k*C_A=k*C_{A0}*(1-x)$

Με επίλυση του ισοζυγίου μάζας για αντιδραστηρα εμβολικής ροής έχουμε:

$$F_{A0} * dx = r_A * dm_{cat} \Rightarrow F_{A0} * dx = k * C_A * dm_{cat} \Rightarrow F_{A0} * dx = k * C_{A0} * (1-x) * dm_{cat} \Rightarrow$$

$$F_{A0} * \frac{dx}{1-x} = k * C_{A0} * dm_{cat} \Rightarrow Q * C_{A0} * \int_0^{x_A} \frac{dx}{1-x} = k * C_{A0} * \int_0^{m_{cat0}} dm_{cat} \Rightarrow Q * [-\ln(1-x_A)] = k * m_{cat0} \Rightarrow$$

$$m_{cat0} = \frac{-\ln(1-x_A) * Q}{k} = 632.3733 \ kg_{cat}$$

Ο όγκος του καταλύτη με βάση την πυκνότητα του είναι:

$$V_{cat} = \frac{m_{cat0}}{\rho_{cat}} = 451.6952 * 10^{-3} \ m^3$$

Ο όγκος του αντιδραστήρα με βάση το πορώδες είναι:

$$\varepsilon = \frac{V_R - V_{cat}}{V_R} \Rightarrow V_R = \frac{V_{cat}}{1-\varepsilon} = 752.8254 * 10^{-3} \ m^3$$

Ο κενός όγκος είναι:

$$V_{κενό} = V_R - V_{cat} = 301.1302 * 10^{-3} \ m^3$$

Ο χρόνος χώρου για καταλυτική διεργασία είναι:

$$\tau_{cat} = \frac{V_{κενό}}{Q} = 90.34 \ s$$

Ο χρόνος χώρου για **μη καταλυτική** διεργασία με τον ίδιο όγκο αντιδραστήρα και την ίδια παροχή θα ήταν:

$$\tau = \frac{V_R}{Q} = 225.8499 \ s$$

ΧΗΜΙΚΕΣ ΚΑΙ ΒΙΟΧΗΜΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ

Δεύτερη πρόοδος (19-01-2010)

Διάρκεια εξέτασης 2 ώρες

Θέμα

Βιομηχανικός πολυτροπικός αντιδραστήρας πλήρους ανάδευσης (CSTR) όγκου V_R=250 lt χρησιμοποιείται για τον ισομερισμό αντιδρώντος Α σε Α' (MB_A=$MB_{A'}$). Η αρχική συγκέντρωση είναι C_{A0}=10 mol/lt και η αντίδραση:

$$A \rightarrow A'$$

Η αντίδραση είναι πρώτης (1ης) τάξης ως προς Α και από πειράματα που έγιναν στις ίδιες συνθήκες σε εργαστηριακή διάταξη διαλείποντος έργου (Batch) βρέθηκε ότι η είναι εξώθερμη με ΔH_R=-37 kJ/mol και ειδική ταχύτητα $3*10^{-3}$ s^{-1}. Το αντιδρών Α εισέρχεται στον αντιδραστήρα με θερμοκρασία T_{in}=50°C ενώ ο αντιδραστήρας ψύχεται με ρευστό θερμοκρασίας T_{env}=20°C. Η επιφάνεια ψύξης είναι S=1m^2 και ο μέσος συντελεστής εναλλαγής θερμότητας είναι U=5W/(m^2*°C). Η θερμοχωρητικότητα του μίγματος εξόδου είναι C_{pmix}=80 J/(mol*°C). Να υπολογιστεί ο χρόνος χώρου του αντιδραστήρα (τ) και η θερμοκρασία του μίγματος εξόδου για μετατροπή του Α κατά 80% σε μόνιμες συνθήκες λειτουργίας.

ΛΥΣΗ

Δεδομένα στο σύστημα μονάδων SI:

$V_R=250*10^{-3}$ m^3

$C_{A0}=10*10^3$ mol/m^3

$\Delta H_R=-37*10^3$ J/mol

$k=3*10^{-3}$ s^{-1}

$T_{in}=50$ ^oC

$T_{env}=20$ ^oC

$S=1$ m^2

$U=5\ W/(m^2*^oC)$

$C_{pmix}=80\ J/(mol*^oC)$

$x_A=0.8$

Ισχύει ότι $C_A=C_{A0}*(1-x_A)$

Για αντίδραση 1ης τάξης ισχύει ότι:

$r_A=k*C_A=k*C_{A0}*(1-x_A)$

Επιλύοντας το ισοζύγιο μάζας για αντιδραστήρα πλήρους ανάδευσης έχουμε:

$$Q*C_{A0}-Q*C_A-r_A*V_R=0 \Rightarrow Q*C_{A0}-Q*C_{A0}*(1-x_A)-k*C_{A0}*(1-x_A)*V_R=0 \Rightarrow$$

$$Q=\frac{k*(1-x_A)*V_R}{x_A}=0.1875*10^{-3}\ \frac{m^3}{s}$$

Ο χρόνος χώρου του αντιδραστήρα είναι:

$$\tau=\frac{V_R}{Q}=1333.3333\ s$$

Για μόνιμες συνθήκες ισχύει ότι:

$$\dot{m}_{in}=\dot{m}_{out}$$

Επίσης ισχύει:

$$F_{Ain}=\frac{\dot{m}_{in}}{MB_A}$$

$$F_{Aout}=\frac{\dot{m}_{out}}{MB_{mix}}$$

Λόγω ισομερισμού ισχύει ότι:

$$MB_A=MB_{A'}=MB_{mix}$$

Άρα

$$F_{Ain}=F_{Aout}=Q*C_{A0}=1.875\ \frac{mol}{s}$$

Επιλύοντας το ισοζύγιο ενέργειας για αντιδραστήρα πλήρους ανάδευσης έχουμε:

$$U*S*(T_{env}-T_{out})+F_{Ain}*(-\Delta H_R)*x_A=F_{mix}*C_{pmix}*(T_{out}-T_{in}) \Rightarrow$$

$$T_{out}=\frac{U*S*T_{env}+F_{Ain}*(-\Delta H_R)*x_A+F_{Ain}*C_{pmix}*T_{in}}{F_{Ain}*C_{pmix}+U*S}=407.097\ ^oC$$