

Semi-BR με Εναλλάκτη Θερμότητας

- Μέχρι τώρα υποθέσαμε ότι η **θερμοκρασία περιβάλλοντος** T_α ήταν χωρικά ομοιόμορφη σε όλη την έκταση του εναλλάκτη.

➤ Η υπόθεση αυτή ισχύει σε PFR/PBR με εξωτερική επιφάνεια αγωγού εκτεθειμένη στην ατμόσφαιρα ή σε CSTR/BR όπου ο ρυθμός ροής του ψυκτικού είναι τόσο μεγάλος που οι θερμοκρασίες εισόδου και εξόδου του ψυκτικού είναι ίδιες.

- Θεωρούμε τώρα την περίπτωση όπου η **θερμοκρασία του ψυκτικού μεταβάλλεται κατά μήκος του εναλλάκτη**, ενώ η **θερμοκρασία του αντιδραστήρα είναι χωρικά ομοιόμορφη**.

Παραδοχή

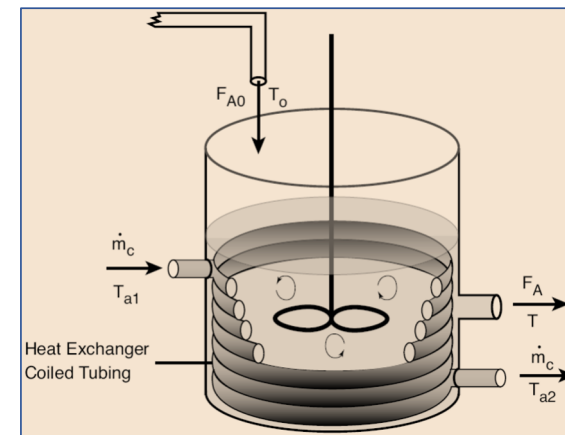
➤ Ως πρώτη προσέγγιση, υποθέτουμε μία «ψευδό»-μόνιμη κατάσταση για τη ροή του ψυκτικού και αγνοούμε τον όρο συσσώρευσης ($dT_\alpha/dt = 0$):

- Το **ισοζύγιο ενέργειας σε Semi-BR** γράφεται αρχικά:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - \sum F_{i0} C_{P_i} (T - T_{i0}) - [\Delta H_{RX}(T)](-r_A V)}{\sum N_i C_{P_i}}$$

Κεφ. 8

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{P_c} (T_{a1} - T) [1 - \exp(-UA / \dot{m}_c C_{P_c})]$$



3. Ισοζύγια Ενέργειας σε Semi-BR

Semi-BR με Εναλλάκτη Θερμότητας

συνέχεια

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - \sum F_{i0} C_{P_i} (T - T_{i0}) - [\Delta H_{Rx}(T)](-r_A V)}{\sum N_i C_{P_i}}$$

Παραδοχή

• Αγνοώντας το αξονικό έργο:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}_{gs} - \dot{Q}_{rs}}{\sum N_i C_{P_i}}$$

• Η παραγόμενη θερμότητα είναι πάλι: $\dot{Q}_{gs} = (r_A V)(\Delta H_{Rx})$

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{P_c} (T_{a1} - T)[1 - \exp(-UA / \dot{m}_c C_{P_c})]$$

• Η αποβαλλόμενη θερμότητα είναι τώρα:

$$\dot{Q}_{rs} = \sum F_{i0} C_{P_i} (T - T_{i0}) + \dot{m}_c C_{P_c} [T - T_{a1}][1 - \exp(-UA / \dot{m}_c C_{P_c})]$$

Σημείωση: Ο δείκτης "s" στις εξισώσεις σημαίνει ότι εφαρμόζονται μόνο για Semi-BR.

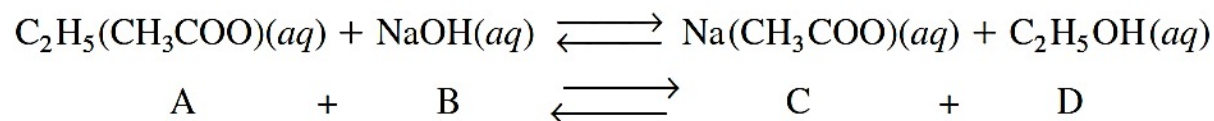
Παραδοχή

• Για μεγάλες παροχές ψυκτικού μέσου:

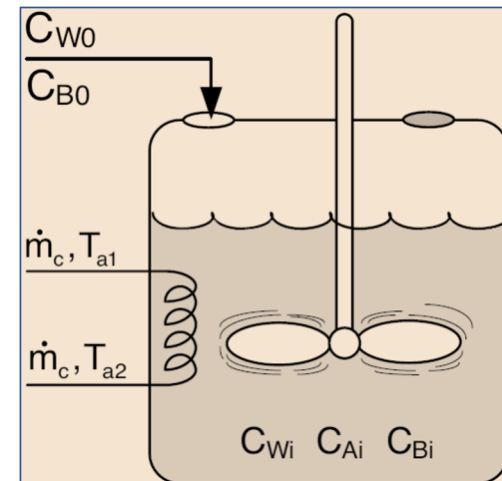
$$\frac{dT}{dt} = \frac{\overbrace{(r_A V)(\Delta H_{Rx})}^{Q_{gs}} - \overbrace{[\sum F_{i0} C_{P_i} (T - T_{i0}) + UA(T - T_a)]}^{Q_{rs}}}{\sum N_i C_{P_i}}$$

Παράδειγμα 9.3 (1/3)

- ❖ Η 2^{ης} τάξης αντίδραση σαπωνοποίησης του οξικού αιθυλεστέρα πρόκειται να πραγματοποιηθεί σε ημισυνεχή αντιδραστήρα.



- ❖ Ενυδατωμένο υδροξείδιο του νατρίου πρόκειται να εισαχθεί σε συγκέντρωση 1 kmol/m³, θερμοκρασία 300 K και ρυθμό 0,004 m³/sec σε αρχικό όγκο 0,2 m³ νερού και οξικού αιθυλεστέρα. Οι αρχικές συγκεντρώσεις του οξικού αιθυλεστέρα και του νερού είναι 5 kmol/m³ και 30,7 kmol/m³, αντίστοιχα. Η αντίδραση είναι εξώθερμη, και απαιτείται η προσθήκη εναλλάκτη θερμότητας για τη διατήρηση της θερμοκρασίας σε τιμή μικρότερη των 315 K. Διαθέτουμε εναλλάκτη θερμότητας με UA = 3000 J/(sec·K). Το ψυκτικό εισέρχεται με ρυθμό 100 kg/sec και θερμοκρασία 285 K.



- Είναι ο εναλλάκτης θερμότητας και ο ρυθμός ροής του ψυκτικού επαρκή για τη διατήρηση της θερμοκρασίας του εναλλάκτη κάτω από τους 315 K; Απεικονίστε γραφικά τις θερμοκρασίες, και τα C_A, C_B και C_C συναρτήσει του χρόνου.

- ❖ Πρόσθετες πληροφορίες: $k = 0,39175 \cdot \exp[5472,7 \cdot (1/273 - 1/T)] \text{ m}^3/(\text{kmol} \cdot \text{sec})$

$$\Delta H^\circ_{\text{Rx}} = -79076 \text{ kJ/kmol}$$

$$C_{\text{PB}} = C_{\text{PC}} = C_{\text{PD}} \approx C_{\text{PW}} = C_{\text{P}} = 75,24 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$$

$$\text{Τροφοδοσία: } C_{\text{W0}} = 55 \text{ kmol/m}^3 \text{ και } C_{\text{B0}} = 1 \text{ kmol/m}^3$$

$$\text{Αρχικά: } T_0 = 300 \text{ K, } C_{\text{Wi}} = 30,7 \text{ kmol/m}^3, C_{\text{Ai}} = 5 \text{ kmol/m}^3 \text{ και } C_{\text{Bi}} = 0$$

$$K_{\text{C}} = 10^{3885,44/T}$$

$$C_{\text{PA}} = 170,7 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$$

$$C_{\text{PC}} = 18 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$$



Παράδειγμα 9.3 (2/3)

$$[I] \frac{dC_A}{dt} = -0,39175 \cdot \exp \left[20 - \frac{5472,7}{T} \right] \cdot \left(C_A \cdot C_B - \frac{C_C^2}{10 \frac{3885,44}{T}} \right) - \frac{0,004 \cdot C_A}{0,2 + 0,004 \cdot t}$$

$$t = 0 \rightarrow C_A = C_{Ai} = 5 \text{ kmol/m}^3$$

$$[II] \frac{dC_B}{dt} = -0,39175 \cdot \exp \left[20 - \frac{5472,7}{T} \right] \cdot \left(C_A \cdot C_B - \frac{C_C^2}{10 \frac{3885,44}{T}} \right) + \frac{0,004 \cdot (0,1 - C_B)}{0,2 + 0,004 \cdot t}$$

$$t = 0 \rightarrow C_B = C_{Bi} = 0 \text{ kmol/m}^3$$

$$[III] \frac{dC_C}{dt} = -0,39175 \cdot \exp \left[20 - \frac{5472,7}{T} \right] \cdot \left(C_A \cdot C_B - \frac{C_C^2}{10 \frac{3885,44}{T}} \right) - \frac{0,004 \cdot C_C}{0,2 + 0,004 \cdot t}$$

$$t = 0 \rightarrow C_C = C_{Ci} = 0 \text{ kmol/m}^3$$

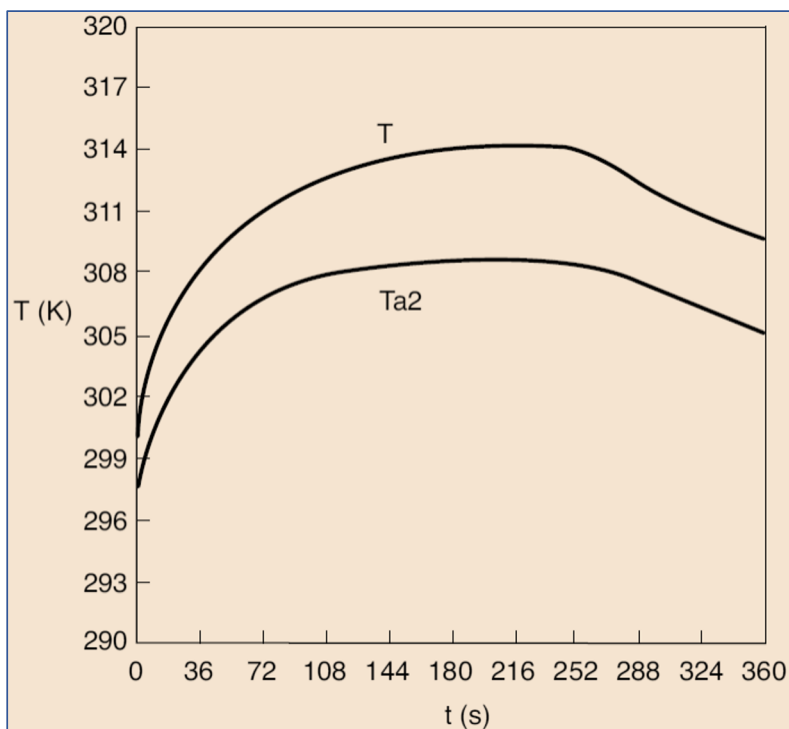
$$[IV] \frac{dC_W}{dt} = \frac{0,004 \cdot (55 - C_W)}{0,2 + 0,004 \cdot t}$$

$$t = 0 \rightarrow C_W = C_{Wi} = 30,7 \text{ kmol/m}^3$$

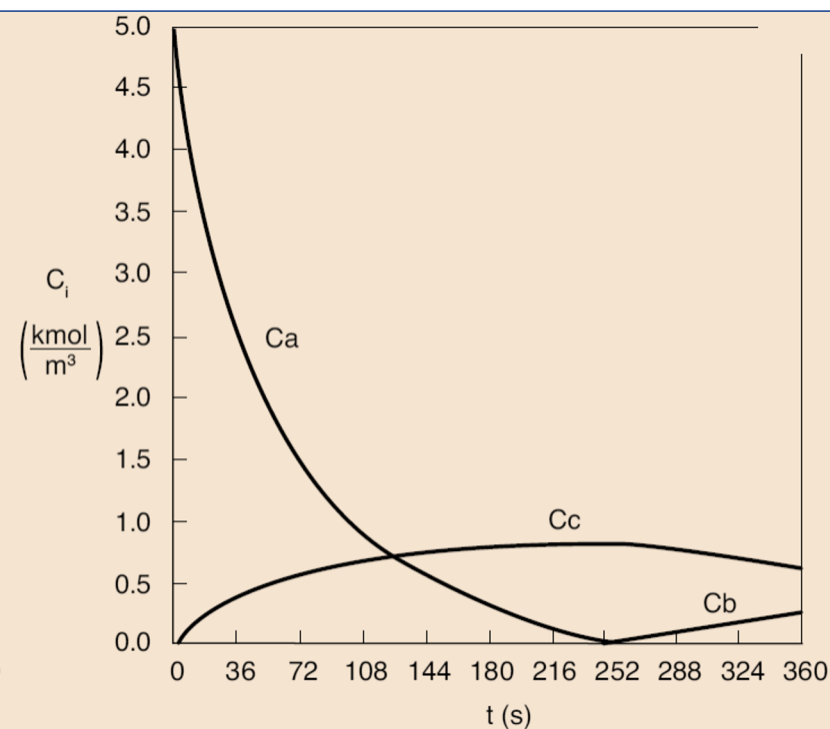
$$[V] \frac{dT}{dt} = \frac{30978023 \cdot \exp \left[20 - \frac{5472,7}{T} \right] \cdot \left(C_A \cdot C_B - \frac{C_C^2}{10 \frac{3885,44}{T}} \right) \cdot (0,2 + 0,004 \cdot t) + 5107428 - 16673,76 \cdot T}{(0,2 + 0,004 \cdot t) \cdot C_A \cdot 170700 + (0,2 + 0,004 \cdot t) \cdot 75400 \cdot (C_B + C_C + C_D + C_W)}$$

$$t = 0 \rightarrow T = T_i = 300 \text{ K}$$

Δυναμική μεταβολή της
θερμοκρασίας λειτουργίας του
αντιδραστήρα και της
θερμοκρασίας εξόδου του
ψυκτικού.



Δυναμική μεταβολή της
συγκέντρωσης των συστατικών A,
B και C του αντιδραστήρα.

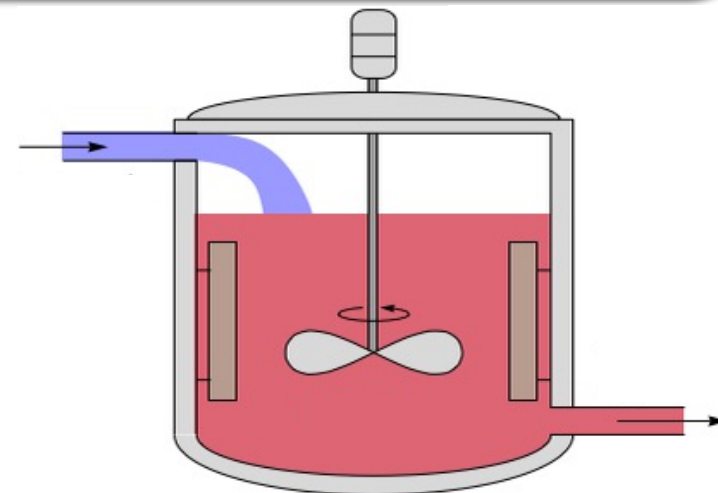


Εκκίνηση

- Κατά την **εκκίνηση ενός CSTR** έχει συνήθως μεγάλη σημασία το πως η θερμοκρασία και η συγκέντρωση προσεγγίζουν τις τιμές τους σε μόνιμη κατάσταση.

- Για παράδειγμα, μία υπερβολική αύξηση της θερμοκρασίας μπορεί να προκαλέσει τη διάσπαση αντιδρώντων ή προϊόντων, ή να αποδειχθεί επικίνδυνη για την ασφαλή λειτουργία του αντιδραστήρα. Σε κάθε μία από τις παραπάνω περιπτώσεις θα λέγαμε ότι το σύστημα ξεπέρασε το πρακτικό όριο σταθερότητας.

- Αν και μπορούμε να επιλύσουμε αριθμητικά τις εξισώσεις συγκέντρωσης-χρόνου και θερμοκρασίας-χρόνου σε μη μόνιμη κατάσταση και να διαπιστώσουμε την ύπαρξη ενός τέτοιου ορίου, είναι συνήθως πιο χρήσιμη η μελέτη της προσέγγισης της μόνιμης κατάστασης χρησιμοποιώντας το διάγραμμα θερμοκρασίας-συγκέντρωσης.



Απόκλιση από τη Λειτουργία σε Μόνιμη Κατάσταση

- Είναι εξίσου σημαντικό να μελετήσουμε τι μπορεί να συμβεί σε έναν CSTR που ενώ λειτουργεί στην **ανώτερη μόνιμη κατάσταση** προκαλείται κάποια διαταραχή στη θερμοκρασία περιβάλλοντος, στη θερμοκρασία εισόδου, στον ρυθμό ροής, στη θερμοκρασία του αντιδραστήρα, ή σε κάποια άλλη μεταβλητή.

[Συνέχεια από Παραδείγματα 8.6, 8.7 και 9.1]

- ❖ Θεωρούμε την παραγωγή προπυλενογλυκόλης σε **CSTR** με **εναλλάκτη θερμότητας**. Αρχικά, στον αντιδραστήρα όγκου 500 gal υπάρχει μόνο νερό με 0,1% κ.β. H_2SO_4 στους 75 °F. Το ρεύμα τροφοδοσίας αποτελείται από 80 lbmol/hr A, 1000 lbmol/hr B με 0,1% κ.β. H_2SO_4 και 100 lbmol/hr M.
- Απεικονίστε **γραφικά** τη **συγκέντρωση του A** και τη **θερμοκρασία** συναρτήσει του **χρόνου**, καθώς και τη **συγκέντρωση** ως προς τη **θερμοκρασία**. Επεκτείνετε το διάγραμμα θερμοκρασίας-συγκέντρωσης για διαφορετικές **αρχικές συγκεντρώσεις** και **θερμοκρασίες**.
- ❖ Το **ψυκτικό** ρέει με ρυθμό 1000 lbmol/hr. Οι **μοριακές πυκνότητες τροφοδοσίας** του A, του B και της M είναι $\rho_{A0} = 0,932 \text{ lbmol/ft}^3$, $\rho_{B0} = 3,45 \text{ lbmol/ft}^3$ και $\rho_{M0} = 1,54 \text{ lbmol/ft}^3$, αντίστοιχα.
- ❖ Το όριο για τη **θερμοκρασία λειτουργίας** του αντιδραστήρα είναι 180 °F.
- ❖ Η αντίδραση είναι 1^{ης} **τάξης** με κινητική σταθερά:
 $k = A \cdot \exp(-E/(R \cdot T)) = 16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-32400/(R \cdot T)) \text{ hr}^{-1}$.
- ❖ Πρόσθετες πληροφορίες:

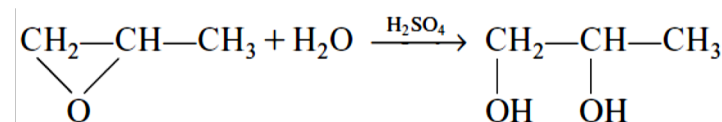
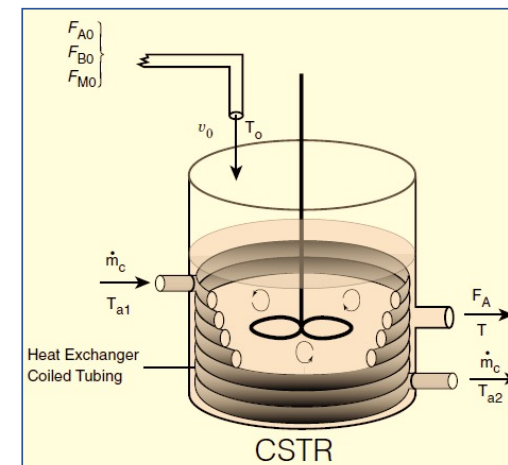
$$UA = 16000 \text{ btu}/(\text{hr} \cdot ^\circ\text{F}) \text{ με } T_{\alpha 1} = 60 \text{ } ^\circ\text{F}$$

$$C_{PW} = 18 \text{ btu}/(\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{F})$$

$$C_{PA} = 35 \text{ btu}/(\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{F}), C_{PB} = 18 \text{ btu}/(\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{F})$$

$$C_{PC} = 46 \text{ btu}/(\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{F}), C_{PM} = 19,5 \text{ btu}/(\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{F})$$

$$\Delta H_{RX} = -36000 \text{ btu/lbmol} \text{ με } \Delta C_P \approx 0$$



Όπου:

A: προπυλενοξείδιο (P.O.)

B: υδατικό διάλυμα του θεικού οξέος, το οποίο δρα ως καταλύτης της αντίδρασης

C: προπυλενογλυκόλη

M: μεθανόλη (αδρανές συστατικό για την αντίδραση)

Παράδειγμα 9.4 (2/4)

Μετατροπές μονάδων:	1 gal = 0,1337 ft ³
	1 °R = °F + 460
	R = 1,987 btu/(lbmol·°R)

$$[I] \frac{dC_A}{dt} = -16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A + \frac{440,63 \cdot (0,182 - C_A)}{66,85}$$

$$t = 0 \rightarrow C_A = C_{Ai} = 0 \text{ lbmol/ft}^3$$

$$[II] \frac{dC_B}{dt} = -16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A + \frac{440,63 \cdot (2,27 - C_B)}{66,85}$$

$$t = 0 \rightarrow C_B = C_{Bi} = 3,45 \text{ lbmol/ft}^3$$

$$[III] \frac{dC_C}{dt} = 16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A - \frac{440,63 \cdot C_C}{66,85}$$

$$t = 0 \rightarrow C_C = C_{Ci} = 0 \text{ lbmol/ft}^3$$

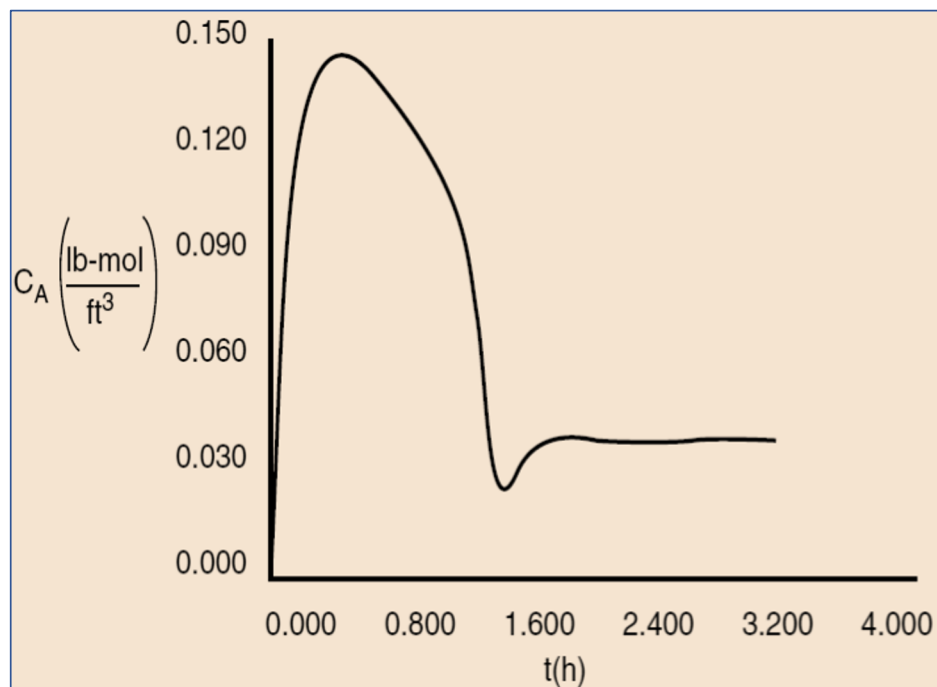
$$[IV] \frac{dC_M}{dt} = \frac{440,63 \cdot (0,227 - C_M)}{66,85}$$

$$t = 0 \rightarrow C_M = C_{Mi} = 0 \frac{\text{lbmol}}{\text{ft}^3}$$

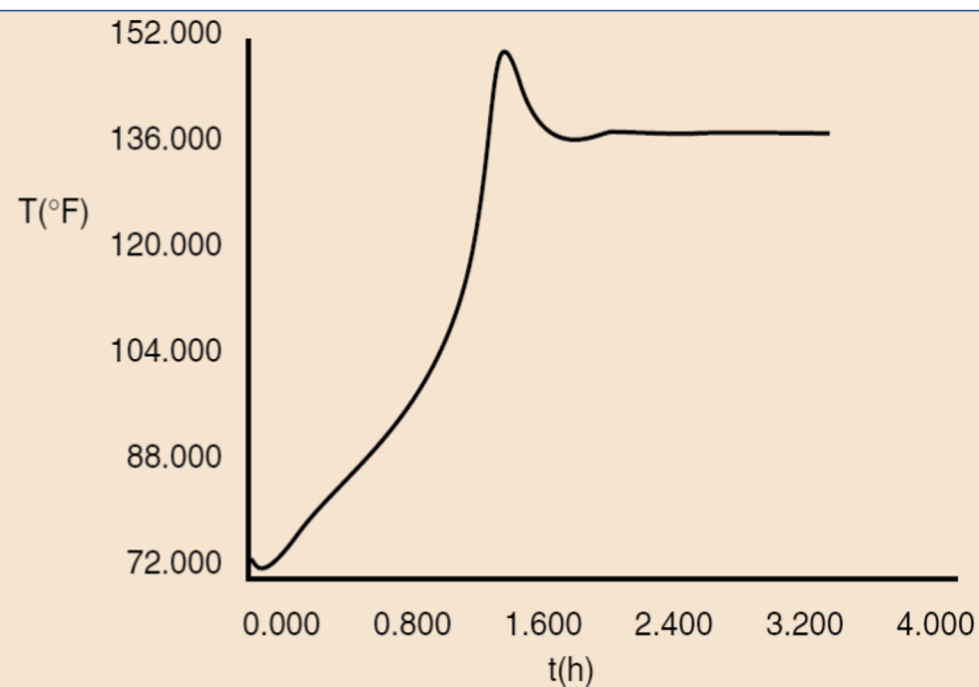
$$[V] \frac{dT}{dt} = \frac{6,1 \cdot 10^{17} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A + 39878,22 - 75,7 \cdot T}{(35 \cdot C_A + 18 \cdot C_B + 46 \cdot C_C + 19,5 \cdot C_M)}$$

$$t = 0 \rightarrow T = T_i = 535 \text{ } ^\circ\text{R}$$

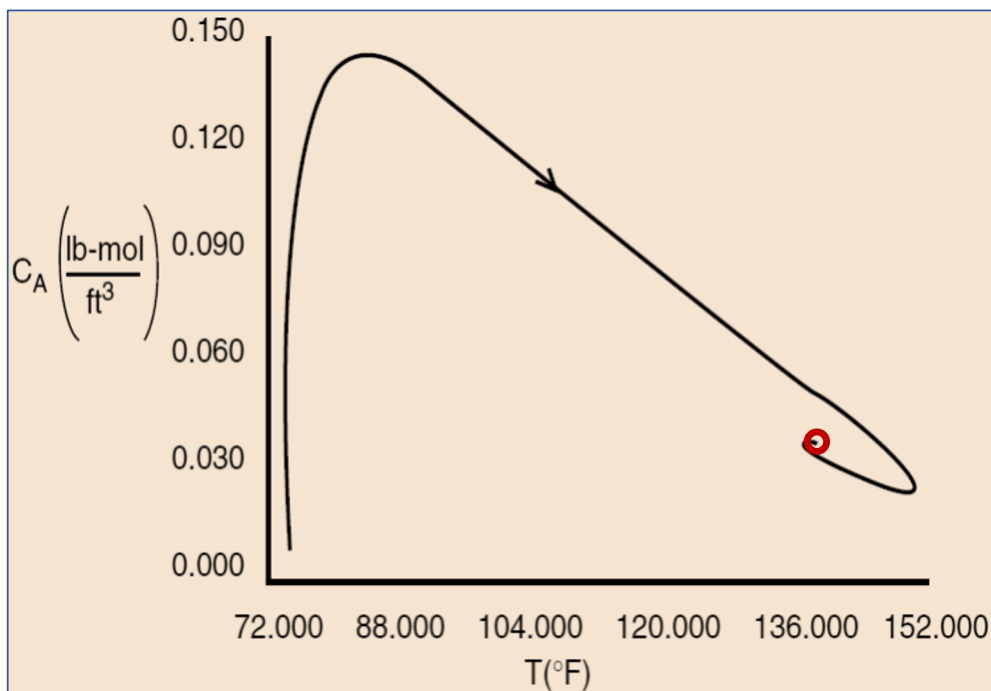
Δυναμική μεταβολή της
συγκέντρωσης του συστατικού A
στον αντιδραστήρα.



Δυναμική μεταβολή της
θερμοκρασίας λειτουργίας του
αντιδραστήρα.

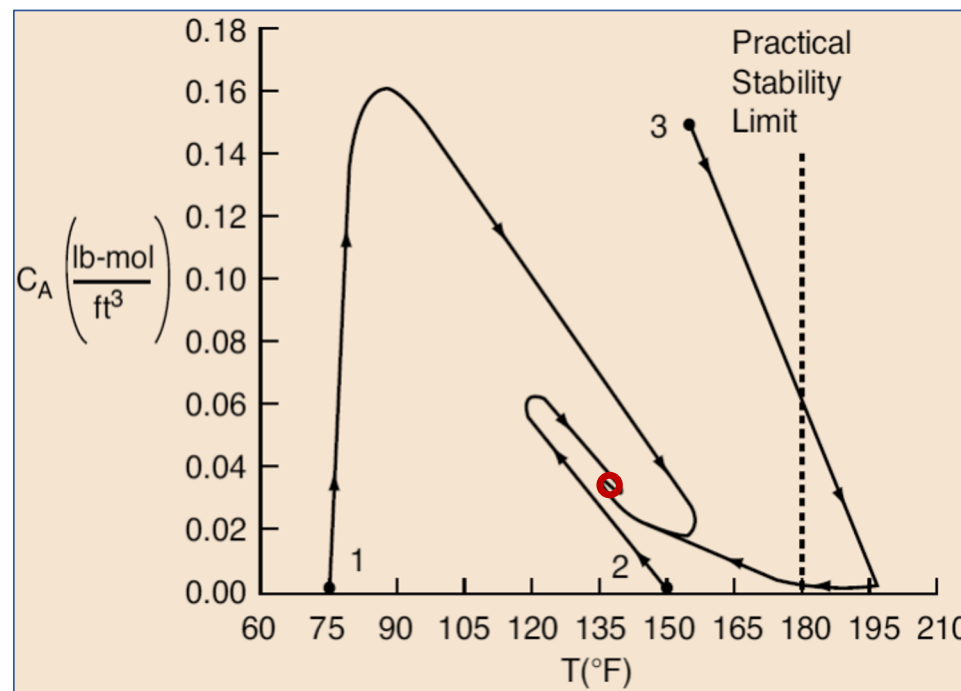


Διάγραμμα θερμοκρασίας-συγκέντρωσης
(διάγραμμα φάσης) για μία λύση.



(1): $T_i = 75 \text{ }^\circ\text{F} = 535 \text{ }^\circ\text{R}$ και $C_{A_i} = 0$

Διάγραμμα θερμοκρασίας-συγκέντρωσης
(διάγραμμα φάσης) για τρεις λύσεις.



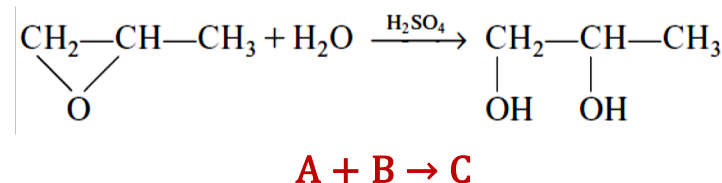
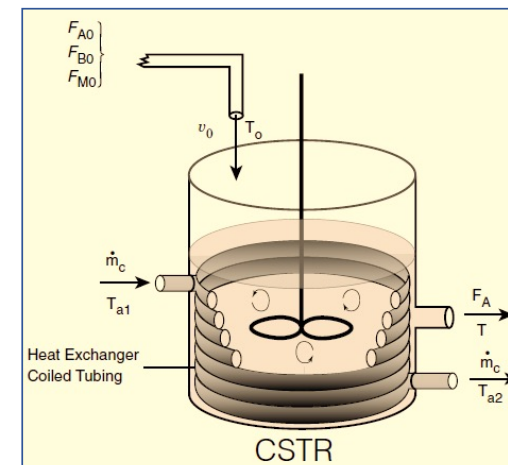
(1): $T_i = 75 \text{ }^\circ\text{F} = 535 \text{ }^\circ\text{R}$ και $C_{A_i} = 0$

(2): $T_i = 150 \text{ }^\circ\text{F} = 610 \text{ }^\circ\text{R}$ και $C_{A_i} = 0$

(3): $T_i = 160 \text{ }^\circ\text{F} = 620 \text{ }^\circ\text{R}$ και $C_{A_i} = 0,15 \text{ lbmol/ft}^3$

[Συνέχεια από Παραδείγματα 8.6, 8.7, 9.1 και 9.4]

- ❖ Θεωρούμε και πάλι την παραγωγή προπυλενογλυκόλης σε **CSTR όγκου 500 gal** με **εναλλάκτη θερμότητας**. Η λειτουργία υπό τις δεδομένες συνθήκες ($T_0 = 75\text{ }^\circ\text{F}$, $T_{a1} = 60\text{ }^\circ\text{F}$) βρίσκεται στην εξής **μόνιμη κατάσταση**: **θερμοκρασία λειτουργίας 138 °F** και **βαθμός μετατροπής 77%**.
- Προσδιορίστε **γραφικά** τη **θερμοκρασία** και τη **μετατροπή** στη **μόνιμη κατάσταση**, αν η **θερμοκρασία τροφοδοσίας ελαττωθεί κατά 5 °F**, υποθέτοντας ότι όλες οι άλλες συνθήκες παραμένουν σταθερές.
- Απεικονίστε **γραφικά** τη **θερμοκρασία** και τη **μετατροπή** συναρτήσει του χρόνου, αφού η **θερμοκρασία τροφοδοσίας ελαττωθεί**.
- ❖ Αρχικά, στον αντιδραστήρα υπάρχει μόνο **νερό με 0,1% κ.β. H_2SO_4** . Το ρεύμα **τροφοδοσίας** αποτελείται από **80 lbmol/hr A**, **1000 lbmol/hr B** με **0,1% κ.β. H_2SO_4** και **100 lbmol/hr M**.
- ❖ Το **ψυκτικό** ρέει με ρυθμό **1000 lbmol/hr**. Οι **μοριακές πυκνότητες τροφοδοσίας** του **A**, του **B** και της **M** είναι $\rho_{A0} = 0,932\text{ lbmol/ft}^3$, $\rho_{B0} = 3,45\text{ lbmol/ft}^3$ και $\rho_{M0} = 1,54\text{ lbmol/ft}^3$, αντίστοιχα.
- ❖ Η αντίδραση είναι **1^{ης} τάξης** με κινητική σταθερά:
 $k = A \cdot \exp(-E/(R \cdot T)) = 16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-32400/(R \cdot T))\text{ hr}^{-1}$.



Όπου:

A: προπυλενοξείδιο (P.O.)

B: υδατικό διάλυμα του θεικού οξέος, το οποίο δρα ως καταλύτης της αντίδρασης

C: προπυλενογλυκόλη

M: μεθανόλη (αδρανές συστατικό για την αντίδραση)

❖ Πρόσθετες πληροφορίες:

$$UA = 16000 \text{ btu}/(\text{hr}\cdot^\circ\text{F}) \text{ με } C_{PW} = 18 \text{ btu}/(\text{lbmol}\cdot^\circ\text{F})$$

$$C_{PA} = 35 \text{ btu}/(\text{lbmol}\cdot^\circ\text{F}), C_{PB} = 18 \text{ btu}/(\text{lbmol}\cdot^\circ\text{F})$$

$$C_{PC} = 46 \text{ btu}/(\text{lbmol}\cdot^\circ\text{F}), C_{PM} = 19,5 \text{ btu}/(\text{lbmol}\cdot^\circ\text{F})$$

$$\Delta H_{RX} = -36000 \text{ btu}/\text{lbmol} \text{ με } \Delta C_p \approx 0$$

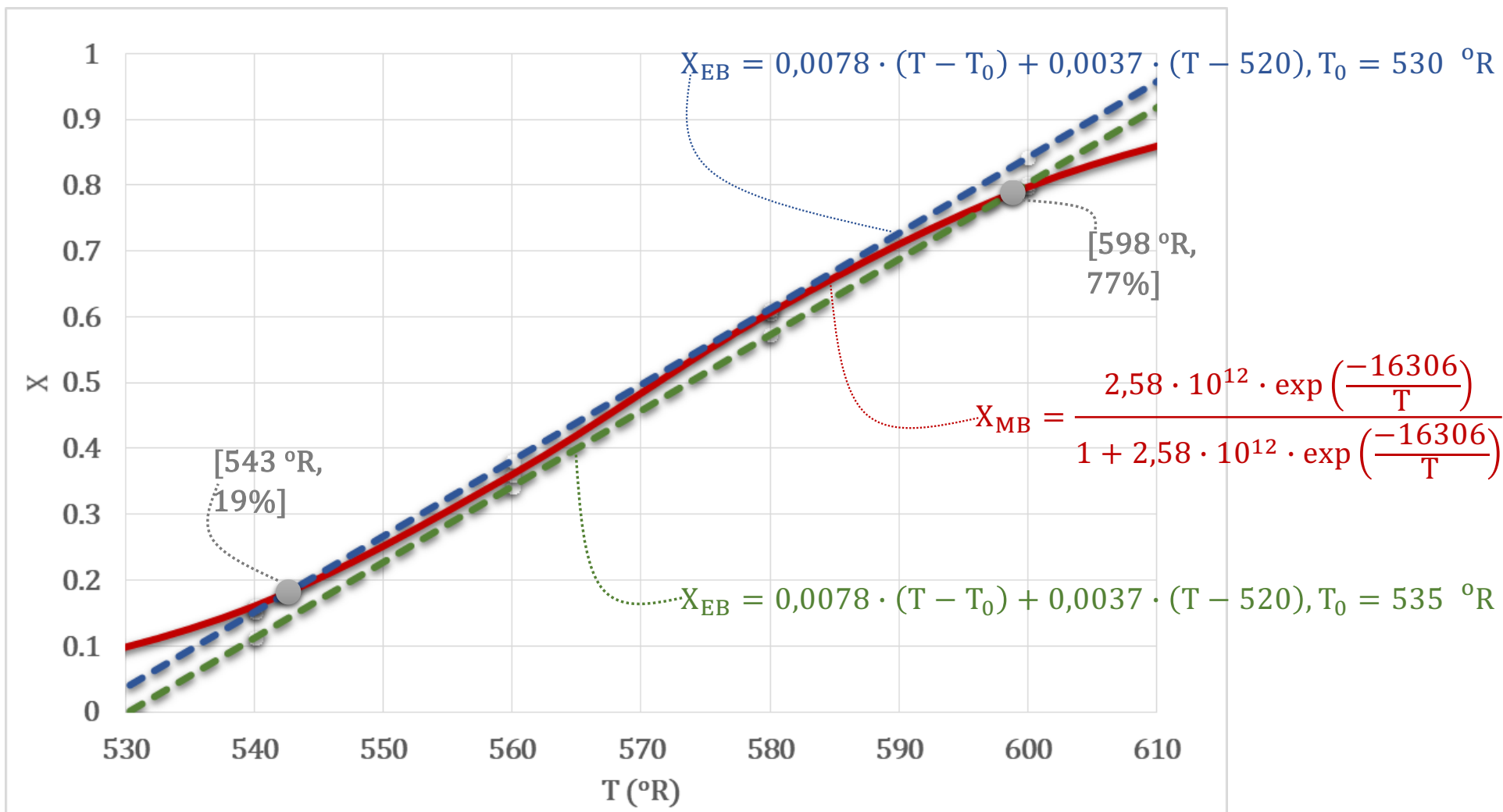
Μετατροπές μονάδων:	$1 \text{ gal} = 0,1337 \text{ ft}^3$
	$1 \text{ }^\circ\text{R} = \text{ }^\circ\text{F} + 460$
	$R = 1,987 \text{ btu}/(\text{lbmol}\cdot^\circ\text{R})$

A. Λειτουργία σε Μόνιμη Κατάσταση:

$$[\text{I}] X_{MB} = \frac{2,58 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right)}{1 + 2,58 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right)}$$

$$[\text{II}] X_{EB} = 0,0078 \cdot (T - T_0) + 0,0037 \cdot (T - 520)$$

Παράδειγμα 9.5 (3/5)



Β. Λειτουργία σε Μη Μόνιμη Κατάσταση (Μετάβαση από τη Μία Μόνιμη Κατάσταση στην Άλλη):

$$[I] \frac{dC_A}{dt} = -16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A + \frac{440,63 \cdot (0,182 - C_A)}{66,85}$$

$$t = 0 \rightarrow C_A = C_{Ai} = 0,038 \text{ lbmol/ft}^3$$

$$[II] \frac{dC_B}{dt} = -16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A + \frac{440,63 \cdot (2,27 - C_B)}{66,85}$$

$$t = 0 \rightarrow C_B = C_{Bi} = 2,1 \text{ lbmol/ft}^3$$

$$[III] \frac{dC_C}{dt} = 16,96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A - \frac{440,63 \cdot C_C}{66,85}$$

$$t = 0 \rightarrow C_C = C_{Ci} = 0,14 \text{ lbmol/ft}^3$$

$$[IV] \frac{dC_M}{dt} = \frac{440,63 \cdot (0,227 - C_M)}{66,85}$$

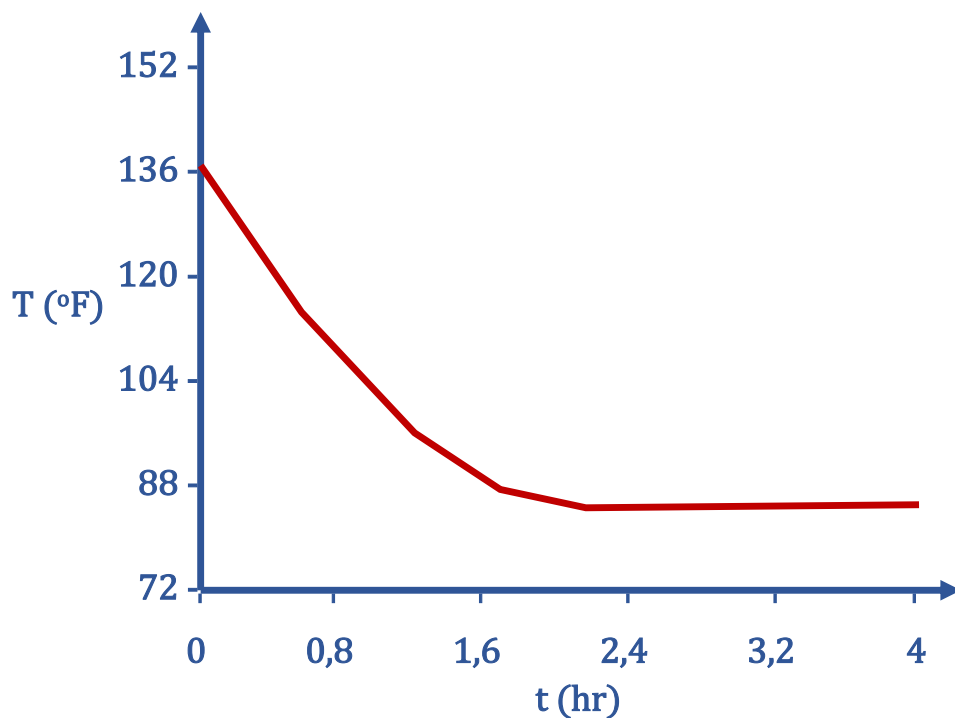
$$t = 0 \rightarrow C_M = C_{Mi} = 0,23 \text{ lbmol/ft}^3$$

$$[V] \frac{dT}{dt} = \frac{6,1 \cdot 10^{17} \cdot \exp\left(\frac{-16306}{T}\right) \cdot C_A + 39878,22 - 75,7 \cdot T}{(35 \cdot C_A + 18 \cdot C_B + 46 \cdot C_C + 19,5 \cdot C_M)}$$

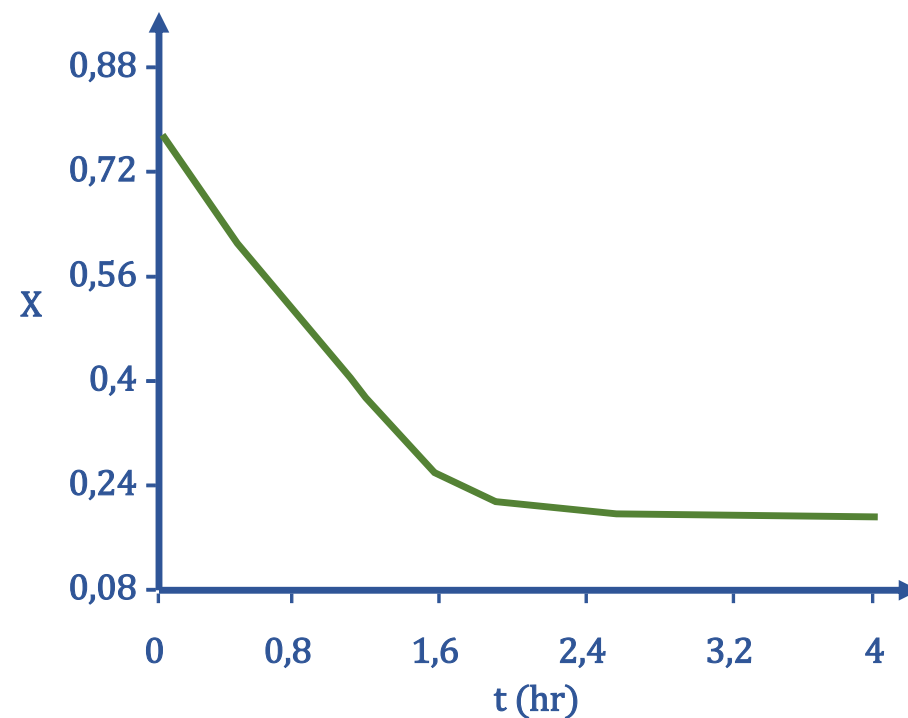
$$t = 0 \rightarrow T = T_i = 598 \text{ }^\circ\text{R}$$

Παράδειγμα 9.5 (5/5)

Δυναμική μεταβολή της θερμοκρασίας λειτουργίας του αντιδραστήρα κατά τη μετάβαση από τη μία μόνιμη κατάσταση στην άλλη.



Δυναμική μεταβολή του βαθμού μετατροπής κατά τη μετάβαση από τη μία μόνιμη κατάσταση στην άλλη.



- Στην περίπτωση **πολλαπλών αντιδράσεων** σε BR ή Semi-BR, το παρακάτω ισοζύγιο ενέργειας τροποποιείται:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}_{gs} - \dot{Q}_{rs}}{\sum N_i C_{P_i}} \begin{cases} \dot{Q}_{gs} = (r_A V)(\Delta H_{Rx}) \\ \dot{Q}_{rs} = \sum F_{i0} C_{P_i} (T - T_{i0}) + \dot{m} C_P [T - T_{a1}] \left[1 - \exp \left[\frac{-UA}{\dot{m} C_{P_i}} \right] \right] \end{cases}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{m}_c C_{P_c} (T_{a1} - T) [1 - \exp(-UA / \dot{m}_c C_{P_c})] + \sum_{i=1}^q r_{ij} V \Delta H_{Rxij}(T) - \sum_{j=1}^m F_{j0} C_{Pj} (T - T_0)}{\sum_{j=1}^m N_{j0} C_{Pj}}$$

Παραδοχή

- Για μεγάλες παροχές ψυκτικού:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{V \sum_{i=1}^q r_{ij} \Delta H_{Rxij} - UA(T - T_a) - \sum_{j=1}^m F_{j0} C_{Pj} (T - T_0)}{\sum_{j=1}^m N_j C_{Pj}}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_g - Q_r}{\sum_{j=1}^m N_j C_{Pj}}$$

$$Q_g = V \sum_{i=1}^q r_{ij} \Delta H_{Rxij}$$

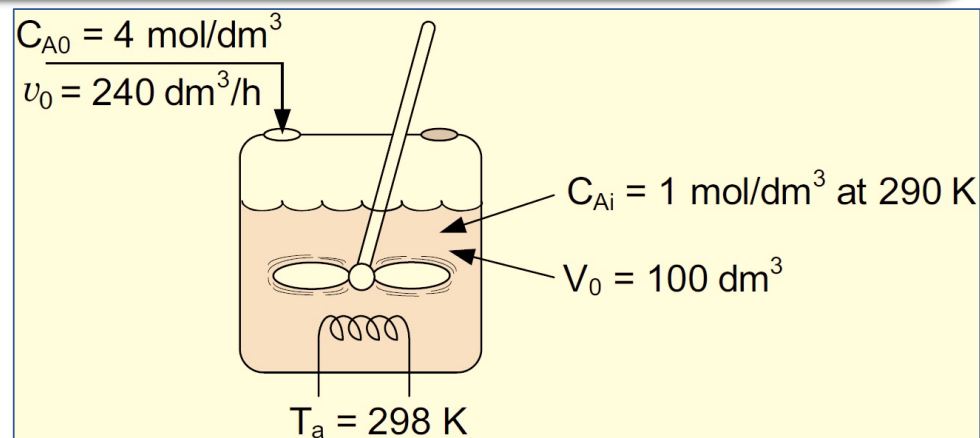
$$Q_r = UA(T - T_a) + \sum F_{j0} C_{Pj} (T - T_0)$$

Παράδειγμα 9.6 (1/3)

❖ Οι αντιδράσεις 1^{ης} τάξης σε σειρά: $2A \xrightarrow{k_{1A}} B \xrightarrow{k_{2B}} 3C$
καταλύονται παρουσία H_2SO_4 .

❖ Οι αντιδράσεις πρόκειται να πραγματοποιηθούν σε **ημισυνεχή αντιδραστήρα**, ο οποίος περιέχει **εναλλάκτη θερμότητας** με $UA = 35000 \text{ cal}/(\text{hr}\cdot\text{K})$ και **θερμοκρασία T_α ίση με 298 K**.

❖ Στον αντιδραστήρα εισάγεται **καθαρό A σε συγκέντρωση 4 mol/hr**, **ογκομετρική ροή 240 dm³/hr** και **θερμοκρασία 305 K**.



❖ Αρχικά στον αντιδραστήρα υπάρχουν **100 dm³ υγρού**, τα οποία περιέχουν **1 mol/dm³ A** και **1 mol/dm³ H₂SO₄**. Οι ταχύτητες των αντιδράσεων είναι ανεξάρτητες της συγκέντρωσης του καταλύτη. Η **αρχική θερμοκρασία** του αντιδραστήρα είναι ίση με **290 K**.

➤ Απεικονίστε **γραφικά** τη θερμοκρασία και τις **συγκεντρώσεις** των χημικών ειδών **ως προς τον χρόνο**.

Πρόσθετες πληροφορίες: $k_{1A} = 1,25 \text{ hr}^{-1}$ στους 320 K με $E_{1A} = 9500 \text{ cal/mol}$
 $k_{2B} = 0,08 \text{ hr}^{-1}$ στους 300 K με $E_{2B} = 7000 \text{ cal/mol}$
 $\Delta H_{R_{x1A}} = -6500 \text{ cal/mol A}$
 $\Delta H_{R_{x2B}} = 8000 \text{ cal/mol B}$

$C_{PA} = 30 \text{ cal}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
 $C_{PB} = 60 \text{ cal}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
 $C_{PC} = 20 \text{ cal}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
 $C_{PH_2SO_4} = 35 \text{ cal}/(\text{mol}\cdot\text{K})$

$$[I] \frac{dC_A}{dt} = -1,25 \cdot \exp \left[14,94 - \frac{4781}{T} \right] \cdot C_A + \frac{240 \cdot (4 - C_A)}{100 + 240 \cdot t}$$

$$t = 0 \rightarrow C_A = C_{Ai} = 1 \text{ mol/dm}^3$$

$$[II] \frac{dC_B}{dt} = 0,625 \cdot \exp \left[14,94 - \frac{4781}{T} \right] \cdot C_A - 0,08 \cdot \exp \left[11,74 - \frac{3523}{T} \right] \cdot C_B - \frac{240 \cdot C_B}{100 + 240 \cdot t}$$

$$t = 0 \rightarrow C_B = C_{Bi} = 0 \text{ mol/dm}^3$$

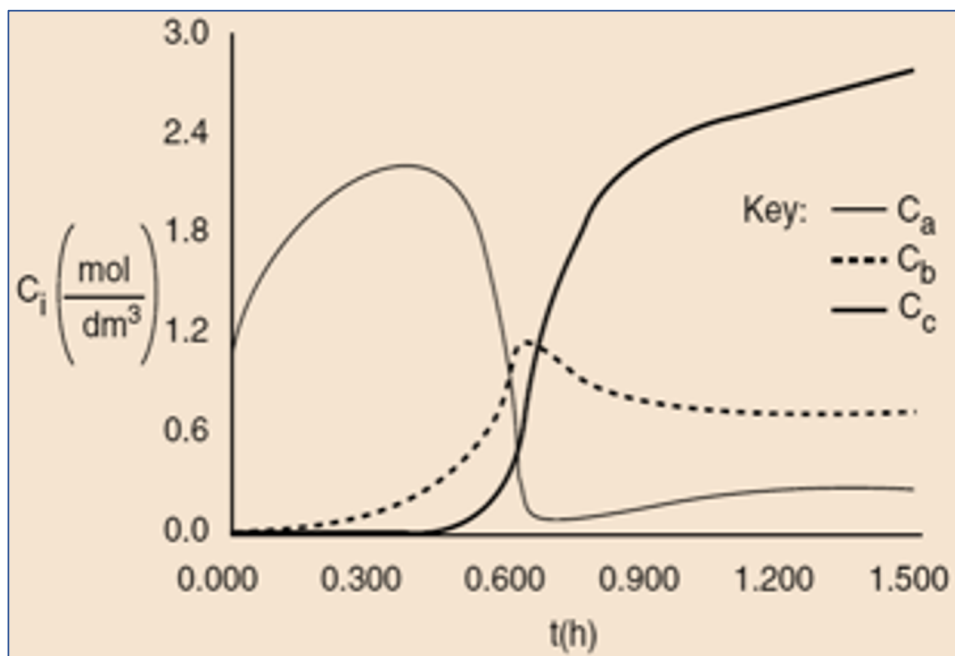
$$[III] \frac{dC_C}{dt} = 0,24 \cdot \exp \left[11,74 - \frac{3523}{T} \right] \cdot C_B - \frac{240 \cdot C_C}{100 + 240 \cdot t}$$

$$t = 0 \rightarrow C_C = C_{Ci} = 0 \text{ mol/dm}^3$$

$$[IV] \frac{dT}{dt} = \frac{(100 + 40 \cdot t) \cdot \left(8125 \cdot \exp \left[14,94 - \frac{4781}{T} \right] \cdot C_A - 640 \cdot \exp \left[11,74 - \frac{3523}{T} \right] \cdot C_B \right) + 19214000 - 63800 \cdot T}{(100 + 40 \cdot t) \cdot (30 \cdot C_A + 60 \cdot C_B + 20 \cdot C_C) + 3500}$$

$$t = 0 \rightarrow T = T_i = 290 \text{ K}$$

Δυναμική μεταβολή των συγκεντρώσεων των τριών συστατικών στον αντιδραστήρα.



Δυναμική μεταβολή της θερμοκρασίας λειτουργίας του αντιδραστήρα.

