Τυπολόγιο – Χημικές Διεργασίες ΙΙ

Ισοζύγια Μάζας

BR:	$\frac{dN_A}{dt} = r_A \cdot V$	$\frac{dX}{dt} = \frac{-r_A \cdot V}{N_{A0}}$
CSTR:	$V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A}$	$V = \frac{F_{A0} \cdot X}{-r_A}$
PFR:	$\frac{dF_A}{dV} = r_A$	$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}}$
PBR:	$\frac{dF_A}{dW} = r'_A$	$\frac{dX}{dW} = \frac{-r'_A}{F_{A0}}$

Semi-BR με τροφοδοσία και όχι απομάκρυνση:	$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} - F_i + r_i \cdot V$	Αν το i δεν υπάρχει στην τροφοδοσία:	$F_{i0} = 0$
		Μεταβολή όγκου για σταθερό v_0:	$V = V_0 + v_0 \cdot t$
CSTR σε μη μόνιμη κατάσταση (μεταβατική):	$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} - F_i + r_i \cdot V$	Αν το i δεν υπάρχει στην τροφοδοσία:	$F_{i0} = 0$

Ισοζύγια Ενέργειας για Αμελητέο W_s, Σταθερά C_P και $T_{i0} = T_0$

Γενικό ισοζύγιο σε μόνιμη κατάσταση:	$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0} \cdot \sum \Theta_i \cdot C_{Pi} \cdot (T - T_0) - F_{A0} \cdot X \cdot \Delta H_{Rx} = 0$	
Αδιαβατικοί αντιδραστήρες:	$X = \frac{\sum\left(\Theta_i \cdot C_{Pi} \cdot (T - T_0)\right)}{-\Delta H_{Rx}}$	$T = T_0 + \frac{-\Delta H_{Rx} \cdot X}{\sum(\Theta_i \cdot C_{Pi})}$
CSTR με εναλλάκτη θερμότητας και πολύ υψηλό $\dot{m}_C$:	$X = \frac{\sum \Theta_i \cdot C_{Pi} \cdot (T - T_0) + \frac{UA \cdot (T - T_\alpha)}{F_{A0}}}{-\Delta H_{Rx}}$	

CSTR με εναλλάκτη θερμότητας για πολύ υψηλό $\dot{m}_C$, $\Delta C_P \approx 0$ και $C_{P0} = \sum \Theta_i \cdot C_{Pi}$:

Παραγόμενη θερμότητα:	$G(T) = \frac{r_A \cdot V \cdot \Delta H_{Rx,TR}}{F_{A0}}$	$\kappa = \frac{UA}{F_{A0} \cdot C_{P0}}$
Αποβαλλόμενη θερμότητα:	$R(T) = C_{P0} \cdot (1 + \kappa) \cdot (T - T_c)$	$T_c = \frac{T_0 + \kappa \cdot T_\alpha}{1 + \kappa}$
PFR με εναλλάκτη θερμότητας (για αδιαβατική λειτουργία $U\alpha = 0$):	$\frac{dT}{dV} = \frac{r_A \cdot \Delta H_{Rx} - U\alpha \cdot (T - T_\alpha)}{\sum(F_i \cdot C_{Pi})}$	$\frac{dT}{dV} = \frac{r_A \cdot \Delta H_{Rx} - U\alpha \cdot (T - T_\alpha)}{F_{A0} \cdot \sum(\Theta_i \cdot C_{Pi} + \Delta C_P \cdot X)}$
PBR με εναλλάκτη θερμότητας (για αδιαβατική λειτουργία $U\alpha = 0$):	$\frac{dT}{dW} = \frac{r'_A \cdot \Delta H_{Rx} - \frac{U\alpha}{\rho_b} \cdot (T - T_\alpha)}{\sum(F_i \cdot C_{Pi})}$	$\frac{dT}{dW} = \frac{r'_A \cdot \Delta H_{Rx} - \frac{U\alpha}{\rho_b} \cdot (T - T_\alpha)}{F_{A0} \cdot \sum(\Theta_i \cdot C_{Pi} + \Delta C_P \cdot X)}$
BR με εναλλάκτη θερμότητας (για αδιαβατική λειτουργία $UA = 0$):	$\frac{dT}{dt} = \frac{r_A \cdot V \cdot \Delta H_{Rx} - UA \cdot (T - T_\alpha)}{\sum(N_i \cdot C_{Pi})}$	

Semi-BR και CSTR μη μόνιμης κατάστασης:

$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \sum F_{i0} \cdot C_{Pi} \cdot (T - T_0) + r_A \cdot V \cdot \Delta H_{Rx}}{\sum(N_i \cdot C_{Pi})}$	$X = \frac{\sum\left(\Theta_i \cdot C_{Pi} \cdot (T - T_0)\right) - \frac{\dot{Q}}{F_{A0}}}{-\Delta H_{Rx}}$
$\dot{Q} = \dot{m}_c \cdot C_{Pc} \cdot (T_{\alpha 1} - T) \cdot \left(1 - \exp\left[\frac{-UA}{\dot{m}_c \cdot C_{Pc}}\right]\right)$	$T_{\alpha 2} = T - (T - T_{\alpha 1}) \cdot \exp\left[\frac{-UA}{\dot{m}_c \cdot C_{Pc}}\right]$

Ισοζύγιο ψυκτικού/θερμαντικού σε PFR/PRB με εναλλάκτη θερμότητας υπό ομορροή (για αντιρροή αλλαγή σειράς στις θερμοκρασίες):	$\frac{dT_\alpha}{dV} = \frac{U\alpha \cdot (T - T_\alpha)}{\dot{m}_C \cdot C_{PC}}$	$\frac{dT_\alpha}{dW} = \frac{\frac{U\alpha}{\rho_b} \cdot (T - T_\alpha)}{\dot{m}_C \cdot C_{PC}}$
CSTR με πολλαπλές αντιδράσεις και εναλλάκτη θερμότητας (i = 1 - q αντιδράσεις, j = 1 - m συστατικά):	$UA \cdot (T_\alpha - T) - F_{A0} \cdot \sum_{j=1}^{m} \Theta_j \cdot C_{Pj} \cdot (T - T_0) + V \cdot \sum_{i=1}^{q} \left(r_{ij} \cdot \Delta H_{Rxij}\right) = 0$	
PFR με πολλαπλές αντιδράσεις και εναλλάκτη θερμότητας (i = 1 - q αντιδράσεις, j = 1 - m συστατικά):	$\frac{dT}{dV} = \frac{\sum_{i=1}^{q}\left(r_{ij} \cdot \Delta H_{Rxij}\right) - U\alpha \cdot (T - T_\alpha)}{\sum_{j=1}^{m}\left(F_j \cdot C_{Pj}\right)}$	

Γενικές σχέσεις:	Ενθαλπία αντίδρασης:	$\Delta H_{Rx} = \Delta H^{o}_{Rx,TR} + \Delta C_P \cdot (T - T_R)$	
	Arrhenius:	$k = k_{TR} \cdot e^{\left[\frac{E}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_R} - \frac{1}{T}\right)\right]}$	$K_C = K_{C,TR} \cdot e^{\left[\frac{\Delta H_{Rx}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_R} - \frac{1}{T}\right)\right]}$

Βιοχημικοί Αντιδραστήρες

Κινητική Michaelis-Menten (MM) για ενζυμικές αντιδράσεις:	$-r_S = \frac{V_{max} \cdot S}{K_M + S}$	Αντίστροφη κινητική MM:	$\frac{1}{-r_S} = \frac{1}{S} \cdot \frac{K_M}{V_{max}} + \frac{1}{V_{max}}$
Αντίστροφη κινητική MM για ανταγωνιστική αναστολή-παρεμπόδιση:	$\frac{1}{-r_S} = \frac{1}{S} \cdot \left[\frac{K_M}{V_{max}} \cdot \left(1 + \frac{[I]}{K_I}\right)\right] + \frac{1}{V_{max}}$		
Αντίστροφη κινητική MM για ανανταγωνιστική αναστολή-παρεμπόδιση:	$\frac{1}{-r_S} = \frac{1}{S} \cdot \frac{K_M}{V_{max}} + \frac{1}{V_{max}} \cdot \left(1 + \frac{[I]}{K_I}\right)$		
Αντίστροφη κινητική MM για μη ανταγωνιστική-παρεμπόδιση:	$\frac{1}{-r_S} = \frac{1}{S} \cdot \left[\frac{K_M}{V_{max}} \cdot \left(1 + \frac{[I]}{K_I}\right)\right] + \frac{1}{V_{max}} \cdot \left(1 + \frac{[I]}{K_I}\right)$		

Κινητική Monod για κυτταρικές καλλιέργειες:	$\mu = \mu_{max} \cdot \frac{C_S}{K_S + C_S}$		
Ρυθμός ανάπτυξης κυττάρων:	$r_g = \mu \cdot C_c$	Ρυθμός θανάτωσης κυττάρων:	$r_d = (k_d + k_t \cdot C_t) \cdot C_C$
Ρυθμός συντήρησης κυττάρων:	$r_m = m \cdot C_c$	Ρυθμός κατανάλωσης υποστρώματος:	$r_S = -(Y_{S/C}) \cdot r_g - r_m$

Κύτταρα:	Ασυνεχής αντιδραστήρας:	$V \cdot \frac{dC_C}{dt} = (r_g - r_d) \cdot V$	Χημειοστάτης:	$D \cdot C_C = r_g - r_d$
Υπόστρωμα:		$V \cdot \frac{dC_S}{dt} = r_S \cdot V$		$D \cdot (C_{S0} - C_S) = -r_S$
Προϊόν:		$V \cdot \frac{dC_P}{dt} = r_P \cdot V$		$D \cdot C_P = r_P$

Καταλυτικοί Αντιδραστήρες

Μη διασπαστική προσρόφηση του A στο ενεργό κέντρο S:	$r_{AD} = k_A \cdot \left(P_A \cdot C_V - \frac{C_{A \cdot S}}{K_A}\right)$	$C_{A \cdot S} = \frac{K_A \cdot P_A \cdot C_t}{1 + K_A \cdot P_A}$
Διασπαστική προσρόφηση του AB στα ενεργά κέντρα S:	$r_{AD} = k_A \cdot \left(P_{AB} \cdot C_V^2 - \frac{C_{A \cdot S} \cdot C_{B \cdot S}}{K_A}\right)$	$C_{A \cdot S} = C_{B \cdot S} = \frac{(K_A \cdot P_{AB})^{1/2} \cdot C_t}{1 + 2 \cdot (K_A \cdot P_{AB})^{1/2}}$

Επιφανειακή αντίδραση $A \cdot S \leftrightarrow B \cdot S$ σε απλό ενεργό κέντρο:	$r_S = k_S \cdot \left(C_{A \cdot S} - \frac{C_{B \cdot S}}{K_S}\right)$
Επιφανειακή αντίδραση $A \cdot S + S \leftrightarrow B \cdot S + S$ σε διπλό ενεργό κέντρο (σε γειτονικό κενό ενεργό κέντρο):	$r_S = k_S \cdot \left(C_{A \cdot S} \cdot C_V - \frac{C_{B \cdot S} \cdot C_V}{K_S}\right)$
Επιφανειακή αντίδραση $A \cdot S + B \cdot S \leftrightarrow C \cdot S + D \cdot S$ σε διπλό ενεργό κέντρο (μεταξύ δύο προσροφημένων χημικών ειδών):	$r_S = k_S \cdot \left(C_{A \cdot S} \cdot C_{B \cdot S} - \frac{C_{C \cdot S} \cdot C_{D \cdot S}}{K_S}\right)$
Επιφανειακή αντίδραση $A \cdot S + B \cdot S' \leftrightarrow C \cdot S' + D \cdot S$ σε διπλό ενεργό κέντρο (μεταξύ δύο προσροφημένων ειδών σε διαφορετικά κέντρα):	$r_S = k_S \cdot \left(C_{A \cdot S} \cdot C_{B \cdot S'} - \frac{C_{C \cdot S'} \cdot C_{D \cdot S}}{K_S}\right)$
Επιφανειακή αντίδραση $A \cdot S + B(g) \leftrightarrow C \cdot S$ Eley-Rideal (αντίδραση μεταξύ ενός προσροφημένου μορίου και ενός μορίου σε αέρια φάση):	$r_S = k_S \cdot \left(C_{A \cdot S} \cdot P_B - \frac{C_{C \cdot S}}{K_S}\right)$

Εκρόφηση του C από το ενεργό κέντρο S:	$r_D = k_D \cdot \left(C_{C \cdot S} - \frac{P_C \cdot C_V}{K_D}\right)$

Γενική εξίσωση απενεργοποίησης καταλύτη n-οστής τάξης με εξάρτηση από τη συγκέντρωση C_i m-οστής τάξης:	$-\frac{d\alpha(t)}{dt} = k_d \cdot \alpha(t)^n \cdot C_i^m$
Απενεργοποίηση λόγω θερμικής γήρανσης 2ης τάξης:	$-\frac{d\alpha(t)}{dt} = k_d \cdot \alpha(t)^2$
Απενεργοποίηση με εναπόθεση άνθρακα ή φράξιμο των πόρων:	$\alpha(t) = \frac{1}{1 + \alpha_2 \cdot C_C}$
Απενεργοποίηση m-οστής τάξης με δηλητηρίαση από το συστατικό P και εξάρτηση από τη συγκέντρωση του n-οστής τάξης:	$-\frac{d\alpha(t)}{dt} = k_d \cdot \alpha(t)^m \cdot C_P^n$

CSTR ρευστοστερεάς κλίνης:	$v_0 \cdot C_{A0} - v \cdot C_A + r'_A \cdot W = \frac{dN_A}{dt}$	Καταλυτικός BR:	$N_{A0} \cdot \frac{dX}{dt} = -r'_A \cdot W$
Καταλυτικός αντιδραστήρας κινούμενης κλίνης:		$\frac{dX}{dW} = \frac{-r'_A}{F_{A0}}$	$-\frac{d\alpha}{dW} = \frac{k_d}{U_S} \cdot \alpha(t)^n$
Καταλυτικός αντιδραστήρας άμεσης μεταφοράς (STTR):		$\frac{dX}{dW} = \frac{-r'_A}{F_{A0}}$	$\frac{dX}{dz} = \frac{-r'_A \cdot \rho_B}{F_{A0}}$

Χρήσιμα Ολοκληρώματα για τον Σχεδιασμό Αντιδραστήρων

$$\int_0^x \frac{dx}{1-x} = \ln\frac{1}{1-x}$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{(1-x)^2} = \frac{1}{1-x_2} - \frac{1}{1-x_1}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{(1-x)^2} = \frac{x}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{1+\varepsilon x} = \frac{1}{\varepsilon}\ln(1+\varepsilon x)$$

$$\int_0^x \frac{(1+\varepsilon x)dx}{1-x} = (1+\varepsilon)\ln\frac{1}{1-x} - \varepsilon x$$

$$\int_0^x \frac{(1+\varepsilon x)dx}{(1-x)^2} = \frac{(1+\varepsilon)x}{1-x} - \varepsilon\ln\frac{1}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{(1+\varepsilon x)^2 dx}{(1-x)^2} = 2\varepsilon(1+\varepsilon)\ln(1-x) + \varepsilon^2 x + \frac{(1+\varepsilon)^2 x}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{(1-x)(\Theta_B - x)} = \frac{1}{\Theta_B - 1}\ln\frac{\Theta_B - x}{\Theta_B(1-x)} \qquad \Theta_B \neq 1$$

$$\int_0^W (1-\alpha W)^{1/2} dW = \frac{2}{3\alpha}[1-(1-\alpha W)^{3/2}]$$

$$\int_0^x \frac{dx}{ax^2+bx+c} = \frac{-2}{2ax+b} + \frac{2}{b} \qquad \text{for } b^2 = 4ac$$

$$\int_0^x \frac{dx}{ax^2+bx+c} = \frac{1}{a(p-q)}\ln\left(\frac{q}{p}\cdot\frac{x-p}{x-q}\right) \qquad \text{for } b^2 > 4ac$$

where p and q are the roots of the equation.

$$ax^2 + bx + c = 0 \qquad \text{i.e., } p, q = \frac{-b \mp \sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

$$\int_0^x \frac{a+bx}{c+gx}dx = \frac{bx}{g} + \frac{ag-bc}{g^2}\ln\frac{c+gx}{c}$$