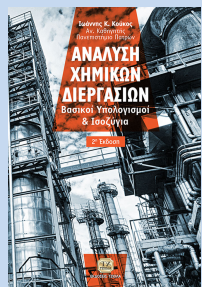




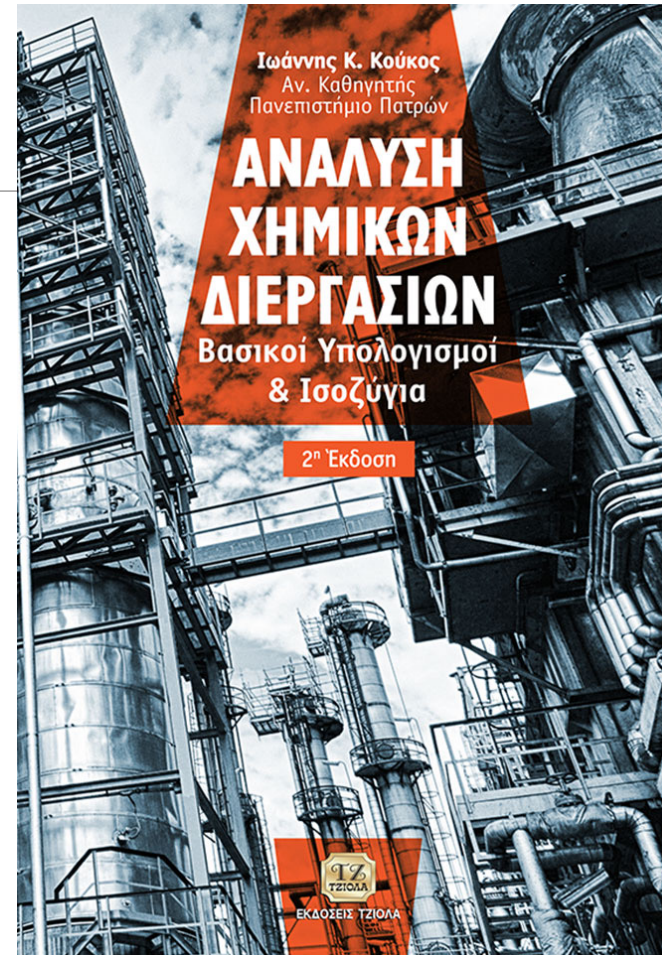
Ισοζύγια μάζας και ενέργειας 4^ο Εξαμ. ΤΧΜ ΔΜΠ 2022/23

ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΙΩΑΝΝΗΣ Κ. ΚΟΥΚΟΣ – ΕΠΙΚΟΥΡΟΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΚΑΛΟΓΙΑΝΝΗΣ

ΜΑΘΗΜΑ 3 : ΙΣΟΖΥΓΙΑ ΜΑΖΑΣ ΜΕ ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ



ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2



ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΟ ΙΣΟΖΥΓΙΟ «ΥΛΙΚΩΝ»



$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Ποσότητα Υλικών} \\ \text{στο χρόνο} \\ t + \Delta t \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{Ποσότητα Υλικών} \\ \text{στο χρόνο} \\ t \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{Παραλαβές} \\ \text{ή "εισροές"} \\ \text{μεταξύ} \\ \text{χρόνου } t \\ \text{και } t + \Delta t \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{Παραδώσεις} \\ \text{ή "εκροές"} \\ \text{μεταξύ} \\ \text{χρόνου } t \\ \text{και } t + \Delta t \end{array} \right\} \\
 + \left\{ \begin{array}{c} \text{Παραγωγή} \\ \text{υλικών} \\ \text{μεταξύ} \\ \text{χρόνου } t \\ \text{και } t + \Delta t \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{Κατανάλωση} \\ \text{υλικών} \\ \text{μεταξύ} \\ \text{χρόνου } t \\ \text{και } t + \Delta t \end{array} \right\}$$

$$\Psi_{t+\Delta t} = \Psi_t + \Psi_{t \rightarrow t+\Delta t}^{in} - \Psi_{t \rightarrow t+\Delta t}^{out} + \Psi_{t \rightarrow t+\Delta t}^{gen} - \Psi_{t \rightarrow t+\Delta t}^{cons}$$

ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΟ ΙΣΟΖΥΓΙΟ



$$\frac{d\Psi(t)}{dt} = \dot{\Psi}_{in}(t) - \dot{\Psi}_{out}(t) + \dot{\Psi}_{gen}(t) - \dot{\Psi}_{cons}(t)$$

ΣΥΣΣΩΡΕΥΣΗ

ΕΙΣΡΟΗ

ΕΚΡΟΗ



ΚΑΘΑΡΗ ΕΙΣΡΟΗ
(ΡΥΘΜΟΣ)

ΠΑΡΑΓΩΓΗ

ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ



ΚΑΘΑΡΗ ΠΑΡΑΓΩΓΗ
(ΡΥΘΜΟΣ)

ΚΑΘΑΡΗ ΠΑΡΑΓΩΓΗ = 0
ΓΙΑ ΔΙΑΤΗΡΗΣΙΜΕΣ
ΠΟΣΟΤΗΤΕΣ

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΣΥΣΤΑΤΙΚΟΥ ΜΕ ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ ($\Psi=n$)



$$\frac{dn_j(t)}{dt} = \dot{n}_{in,j}(t) - \dot{n}_{out,j}(t) + \dot{n}_{gen,j}(t) - \dot{n}_{cons,j}(t)$$

ΣΥΣΣΩΡΕΥΣΗ

ΕΙΣΡΟΗ

ΕΚΡΟΗ

ΠΑΡΑΓΩΓΗ (ΠΡΟΪΟΝ)

ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗ
(ΑΝΤΙΔΡΩΝ)

ΚΑΘΑΡΟΣ ΡΥΘΜΟΣ ΕΙΣΡΟΗΣ ΜΑΖΑΣ

ΚΑΘΑΡΟΣ ΡΥΘΜΟΣ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΜΑΖΑΣ
ΜΕ ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ $\neq 0$

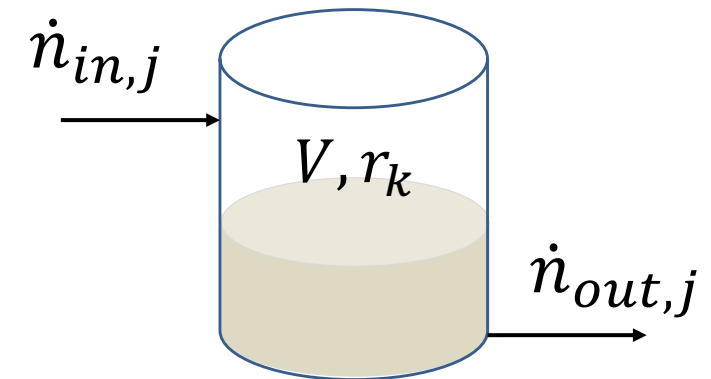
Η ΜΑΖΑ ΕΝΟΣ ΣΥΣΤΑΤΙΚΟΥ **ΔΕΝ** ΕΪΝΑΙ
ΔΙΑΤΗΡΗΣΙΜΗ ΠΟΣΟΤΗΤΑ

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΣΥΣΤΑΤΙΚΟΥ ΜΕ ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ



$$\frac{dn_j}{dt} = \dot{n}_{in,j} - \dot{n}_{out,j} + V \sigma_{k,j} r_k$$

$$\frac{d(Vc_j)}{dt} = \dot{F}_{in} c_{in,j} - \dot{F}_{out} c_j + V \sigma_{k,j} r_k$$



$$\nu_{A_1} A_1 + \nu_{A_2} A_2 + \dots \xrightarrow{r_k} \nu_{\Pi_1} \Pi_1 + \nu_{\Pi_2} \Pi_2 + \dots$$

ν : στοιχειομετρικοί συντελεστές > 0

$$\sigma_{A_1} A_1 + \sigma_{A_2} A_2 + \dots \sigma_{\Pi_1} \Pi_1 + \sigma_{\Pi_2} \Pi_2 + \dots = 0$$

σ : στοιχειομετρικοί αριθμοί < 0 για αντιδρώντα και > 0 για προϊόντα

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΣΥΣΤΑΤΙΚΟΥ ($\Psi = n_j = m_j / MW$)



$$r = \frac{1}{\sigma_j} \cdot \left(\frac{1}{V} \cdot \frac{dn_j}{dt} \right)_{O.E.}$$

ΡΥΘΜΟΣ ΧΗΜΙΚΗΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ

$$\xi = rV = \frac{1}{\sigma_j} \cdot \left(\frac{dn_j}{dt} \right)_{O.E.}$$

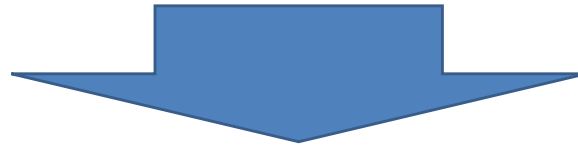
ΠΡΟΟΔΟΣ ΧΗΜΙΚΗΣ
ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ

$$\frac{d(Vc_j)}{dt} = \dot{F}_{in} c_{in,j} - \dot{F}_{out} c_j + V \sum_k \sigma_{k,j} r_k$$

ΙΣΟΖΥΓΙΟ ΜΑΖΑΣ ΣΥΣΤΑΤΙΚΟΥ ΜΕ ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ ΚΑΙ ΜΟΝΙΜΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ



$$\frac{d(Vc_j)}{dt} = \dot{F}_{in} c_{in,j} - \dot{F}_{out} c_j + V \sum_k \sigma_{k,j} r_k$$

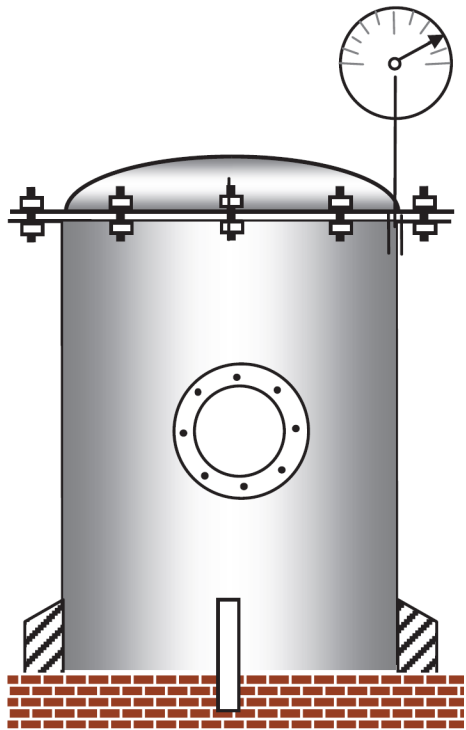


$$\dot{F}_{in} c_{in,j} - \dot{F}_{out} c_j = V \sum_k (-\sigma_{k,j}) r_k$$

ΜΟΝΙΜΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ

$$\dot{F}_{in} c_{in,j} - \dot{F}_{out} c_j = \sum_k (-\sigma_{k,j}) \xi_k$$

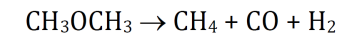
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ



t (s)	P (mmHg)
0	420
57	584
85	662
114	743
145	815
182	891
219	954
261	1013
299	1054

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2.4

Στο αυτόκλειστο σταθερού όγκου του **Σχήματος 2.6** τοποθετείται καθαρός δι-μεθυλαιθέρας (dimethyl ether, DME) σε αέρια μορφή και το σύστημα διατηρείται σε σταθερή θερμοκρασία 552 °C. Στις συνθήκες του πειράματος ο DME διασπάται σύμφωνα με την αντίδραση



Οι Hinshelwood και Askey (Proc. Roy. Soc. London, A115, σελ. 215, 1927) δίνουν τα δεδομένα του **Πίνακα 2.1** για την εξέλιξη της πίεσης του δοχείου ως συνάρτηση του χρόνου.

Η αντίδραση πιστεύεται ότι είναι πρώτης τάξης ως προς τη συγκέντρωση του DME:

$$r = k c_{\text{DME}}$$

όπου k ([=] 1/s) σταθερά που εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία. Να ελέγξετε εάν η παραπάνω εξίσωση ρυθμού (καταστατική εξίσωση) περιγράφει ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα.

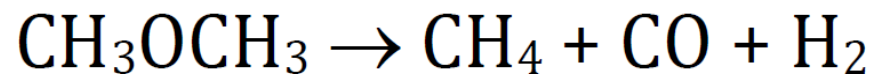


Λύση

$$\frac{d(Vc_j)}{dt} = \underbrace{\dot{F}_{in} c_{in,j}}_{=0} - \underbrace{\dot{F}_{out} c_j}_{=0} + V \sigma_{k,j} r$$

Constant volume

$$\frac{dc_j}{dt} = \sum_k \sigma_{k,j} r \Rightarrow \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} c_{DME} \\ c_{Me} \\ c_{CO} \\ c_{H_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{DME} \\ \sigma_{Me} \\ \sigma_{CO} \\ \sigma_{H_2} \end{bmatrix} k c_{DME}$$



Λύση

$$\frac{dc_{DME}}{dt} = -kc_{DME} \Rightarrow \ln c_{DME} = -kdt \Rightarrow \frac{c_{DME}(t)}{c_{DME}(0)} = e^{-kt}$$

$$p_{DME}(t)V = n_{DME}(T)RT \Rightarrow c_{DME}(t) = \frac{n_{DME}(t)}{V} = \frac{p_{DME}(t)}{RT}$$

$$\Rightarrow \frac{c_{DME}(t)}{c_{DME}(0)} = \frac{p_{DME}(t)}{p_{DME}(0)} = e^{-kt}$$

Λύση

$$\frac{dc_{Me}(t)}{dt} = +kc_{DME}(t) = kc_{DME}(0)e^{-kt}$$

$$\Rightarrow dc_{Me}(t) = -c_{DME}(0) \int_0^t d(e^{-k\tau}) \Rightarrow \frac{c_{Me}(t)}{c_{DME}(0)} = 1 - e^{-kt}$$

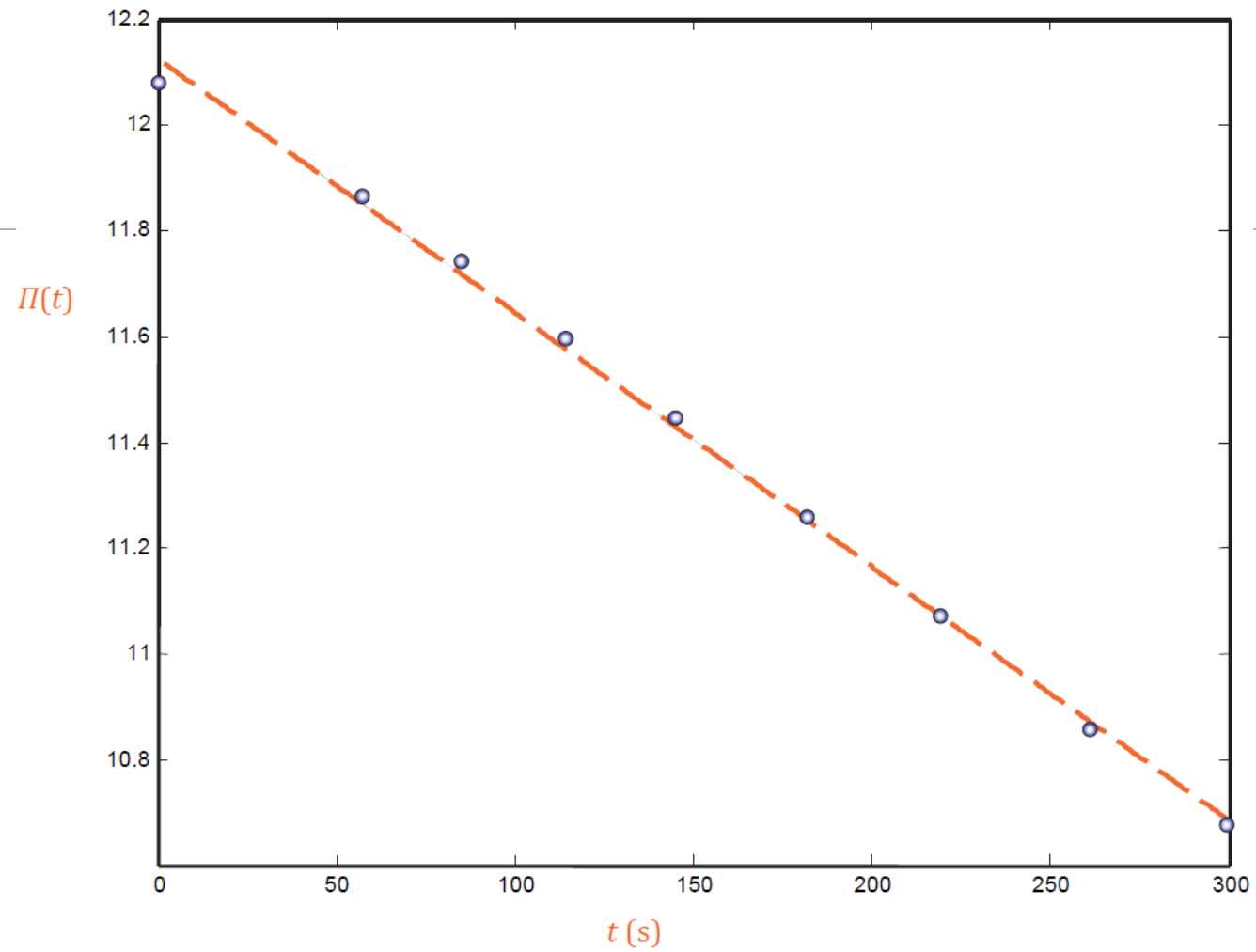
$$c_{Me}(t) = \frac{p_{Me}(t)}{RT}$$

$$\Rightarrow \frac{c_{Me}(t)}{c_{DME}(0)} = \frac{p_{Me}(t)}{p_{DME}(0)} = 1 - e^{-kt} = \frac{p_{CO}(t)}{p_{DME}(0)} = \frac{p_{H_2}(t)}{p_{DME}(0)}$$

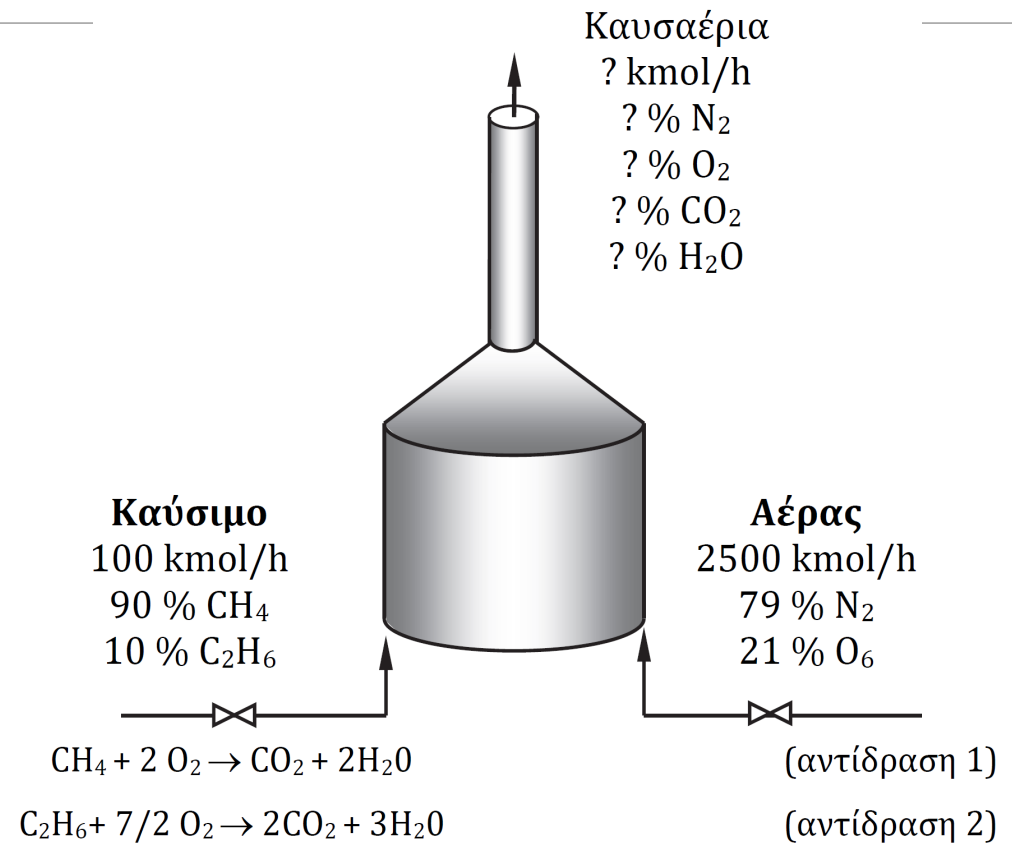
Λύση

$$\begin{aligned}P(t) &= p_{DME}(t) + p_{Me}(t) + p_{CO}(t) + p_{H_2}(t) \\&= p_{DME}(0) [e^{-kt} + 3(1 - e^{-kt})] = p_{DME}(0) [3 - 2e^{-kt}] \Rightarrow \dots \\ \Rightarrow \Pi(t) &= \ln\left(\frac{3P(0) - P(t)}{2P(0)}\right) = -kt\end{aligned}$$

Λύση



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

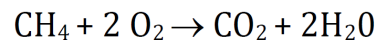


Λύση

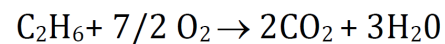
$$\underbrace{\dot{F}_{in} c_{in,j}}_{n_{in,j}} - \underbrace{\dot{F}_{out} c_{out,j}}_{n_{out,j}} = \sum_k (-\sigma_{k,j}) \xi_k$$

$$n_{in,j} - n_{out,j} = (-\sigma_{1,j}) \xi_1 + (-\sigma_{2,j}) \xi_2$$

$$j = \text{CH}_4, \text{C}_2\text{H}_6, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}$$



(αντίδραση 1)



(αντίδραση 2)

Λύση

MATLAB R2019a - academic use

HOME PLOTS APPS EDITOR PUBLISH VIEW

New Open Save Find Files Compare Print Go To Find Insert Comment Indent Breakpoints Run

C:\Users\ikook\OneDrive\Documents\MATLAB

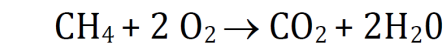
```
Editor - C:\Users\ikook\OneDrive\Documents\MATLAB\example2_5.m
example2_2.m x example2_5.m x +
1 % example 2.5
2 - clear all
3 - sigma=[-1 0
4         0 -1
5         -2 -7/2
6         0 0
7         1 2
8         2 3];
9 - A=[eye(6) -sigma; eye(2) zeros(2,6)];
10 - b=[90 10 525 1975 0 0 0 0]';
11 - x=inv(A)*b
```

Command Window

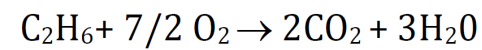
New to MATLAB? See resources for [Getting Started](#).

```
x =
     0
     0
    310
   1975
    110
    210
     90
    10
```

fx >>



(αντίδραση 1)



(αντίδραση 2)