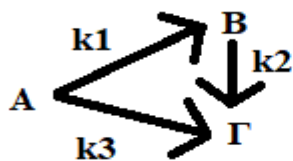


Άσκηση Ε2 (βιβλίου)



αντιδραστήρας: CSTR

$$V=2\text{m}^3$$

$$F=0.1\text{m}^3/\text{min}$$

$$[A_0]=2\text{mol/l}$$

$$r_1=k_1[A] \quad k_1=0.1\text{min}^{-1}$$

$$r_2=k_2[B] \quad k_2=0.1\text{min}^{-1}$$

$$r_3=k_3[A] \quad k_3=0.05\text{min}^{-1}$$

a) Βρείτε την σύσταση εξόδου:

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό A:

$$V \frac{d[A]}{dt} = F[A_0] - F[A] - r_1 V - r_3 V$$

$$0 = F[A_0] - F[A] - k_1[A]V - k_3[A]V$$

$$[A] = \frac{F[A_0]}{(k_1 V + k_3 V + F)}$$

$$[A] = \frac{0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}} \cdot 2 \frac{\text{mol}}{\text{l}}}{0.1 \frac{1}{\text{min}} \cdot 2\text{m}^3 + 0.05 \frac{1}{\text{min}} \cdot 2\text{m}^3 + 0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}}}$$

$$[A] = \mathbf{0.5M}$$

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό B:

$$V \frac{d[B]}{dt} = F[B_0] - F[B] + r_1 V - r_2 V$$

$$0 = -F[B] + k_1[A]V - k_2[B]V$$

$$[B] = \frac{k_1[A]V}{(F + k_2 V)}$$

$$[B] = \frac{0.1 \frac{1}{\min} \cdot 0.5 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 2\text{m}^3}{0.1 \frac{\text{m}^3}{\min} + 0.1 \frac{1}{\min} \cdot 2\text{m}^3}$$

$$[B] = \mathbf{0.333M}$$

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό Γ:

$$V \frac{d[\Gamma]}{dt} = F[\Gamma_0] - F[\Gamma] + r_2 V + r_3 V$$

$$0 = -F[\Gamma] + k_2[B]V + k_3[A]V$$

$$[\Gamma] = \frac{0.1 \frac{1}{\min} \cdot 0.333 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 2\text{m}^3 + 0.05 \frac{1}{\min} \cdot 0.5 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 2\text{m}^3}{0.1 \frac{\text{m}^3}{\min}}$$

$$[\Gamma] = \mathbf{1.167M}$$

b) Βρείτε την άριστη τιμή του ρυθμού παροχής (cm³/min) για να μεγιστοποιηθεί η περιεκτικότητα των προϊόντων σε B

Από το ισοζύγιο μάζας του συστατικού B έχουμε:

$$[B] = \frac{k_1[A]V}{(F + k_2 V)}$$

$$\text{όπου,} \quad [A] = \frac{F[A_0]}{(k_1 V + k_3 V + F)}$$

$$[B] = \frac{F[A_0]k_1 V}{(k_1 V + k_3 V + F) \cdot (F + k_2 V)}$$

Αντικαθιστώντας τις σταθερές ισορροπίας, τον όγκο και την αρχική συγκέντρωση του Α:

$$[B] = \frac{0.4F}{(F + 0.2 + 0.1) \cdot (F + 0.2)}$$

$$[B] = \frac{0.4F}{(F^2 + 0.5F + 0.06)}$$

Προκειμένου να βρούμε την παροχή με βάση την οποία μεγιστοποιείται η συγκέντρωση του Β στην έξοδο του αντιδραστήρα πρέπει να λύσουμε την παράγωγο του Β, ως προς την παροχή, ίση με το μηδέν:

$$\frac{d[B]}{dF} = 0$$

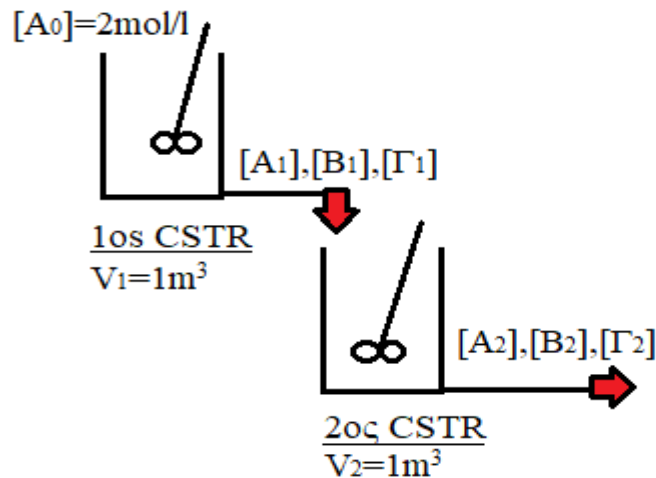
$$\frac{0.4(F^2 + 0.5F + 0.06) - 0.4F(2F + 0.5)}{(F^2 + 0.5F + 0.06)^2} = 0$$

$$F^2 + 0.5F + 0.06 - 2F^2 - 0.5F = 0$$

$$F^2 = 0.06$$

$$\mathbf{F = 0.245 \frac{m^3}{min}}$$

c) Βρείτε την σύσταση εξόδου αν αντί για έναν αντιδραστήρα CSTR έχουμε 2 αντιδραστήρες CSTR σε σειρά, όγκου 1m^3 ο καθένας



- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό A (1^{ος} αντιδραστήρας):

$$V_1 \frac{d[A_1]}{dt} = F[A_0] - F[A_1] - r_1 V_1 - r_3 V_1$$

$$0 = F[A_0] - F[A_1] - k_1[A_1]V_1 - k_3[A_1]V_1$$

$$[A_1] = \frac{F[A_0]}{(k_1 V_1 + k_3 V_1 + F)}$$

$$[A_1] = \frac{0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}} \cdot 2 \frac{\text{mol}}{\text{l}}}{0.1 \frac{1}{\text{min}} \cdot 1\text{m}^3 + 0.05 \frac{1}{\text{min}} \cdot 1\text{m}^3 + 0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}}}$$

$$[A_1] = \mathbf{0.8M}$$

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό A (2^{ος} αντιδραστήρας):

$$V_2 \frac{d[A_2]}{dt} = F[A_1] - F[A_2] - r_1 V_2 - r_3 V_2$$

$$0 = F[A_1] - F[A_2] - k_1[A_2]V_2 - k_3[A_2]V_2$$

$$[A_2] = \frac{F[A_1]}{(k_1 V_2 + k_3 V_2 + F)}$$

$$[A_2] = \frac{0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}} \cdot 0.8 \frac{\text{mol}}{\text{l}}}{0.1 \frac{1}{\text{min}} \cdot 1\text{m}^3 + 0.05 \frac{1}{\text{min}} \cdot 1\text{m}^3 + 0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}}}$$

$$[A_2] = \mathbf{0.32M}$$

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό B (1^{ος} αντιδραστήρας):

$$V_1 \frac{d[B_1]}{dt} = F[B_0] - F[B_1] + r_1 V_1 - r_2 V_1$$

$$0 = -F[B_1] + k_1[A]V_1 - k_2[B_1]V_1$$

$$[B_1] = \frac{k_1[A_1]V_1}{(F + k_2 V_1)}$$

$$[B_1] = \frac{0.1 \frac{1}{\text{min}} \cdot 0.8 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 1\text{m}^3}{0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}} + 0.1 \frac{1}{\text{min}} \cdot 1\text{m}^3}$$

$$[B_1] = \mathbf{0.4M}$$

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό B (2^{ος} αντιδραστήρας):

$$V_2 \frac{d[B_2]}{dt} = F[B_1] - F[B_2] + r_1 V_2 - r_2 V_2$$

$$0 = F[B_1] - F[B_2] + k_1[A_2]V_2 - k_2[B_2]V_2$$

$$[B_2] = \frac{F[B_1] + k_1[A_2]V_2}{F + k_2 V_2}$$

$$[B_2] = \frac{0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}} \cdot 0.4 \frac{\text{mol}}{\text{l}} + 0.1 \frac{1}{\text{min}} \cdot 0.32 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 1\text{m}^3}{0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{min}} + 0.1 \frac{1}{\text{min}} \cdot 1\text{m}^3}$$

$$[B_2] = 0.36M$$

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό Γ (1^{ος} αντιδραστήρας):

$$V_1 \frac{d[\Gamma_1]}{dt} = F[\Gamma_0] - F[\Gamma_1] + r_2 V_1 + r_3 V_1$$

$$0 = -F[\Gamma_1] + k_2[B_1]V_1 + k_3[A_1]V_1$$

$$[\Gamma_1] = \frac{0.1 \frac{1}{\min} \cdot 0.4 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 1\text{m}^3 + 0.05 \frac{1}{\min} \cdot 0.8 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 1\text{m}^3}{0.1 \frac{\text{m}^3}{\min}}$$

$$[\Gamma_1] = 0.8M$$

- Ισοζύγιο μάζας για το συστατικό Γ (2^{ος} αντιδραστήρας):

$$V_2 \frac{d[\Gamma_2]}{dt} = F[\Gamma_1] - F[\Gamma_2] + r_2 V_2 + r_3 V_2$$

$$0 = F[\Gamma_1] - F[\Gamma_2] + k_2[B_2]V_2 + k_3[A_2]V_2$$

$$[\Gamma_2] = \frac{F[\Gamma_1] + k_2[B_2]V_2 + k_3[A_2]V_2}{F}$$

$$[\Gamma_2] = \frac{0.1 \frac{1}{\min} \cdot 0.8 \frac{\text{mol}}{\text{l}} + 0.05 \frac{1}{\min} \cdot 0.32 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 1\text{m}^3 + 0.1 \frac{1}{\min} \cdot 0.36 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 1\text{m}^3}{0.1 \frac{\text{m}^3}{\min}}$$

$$[\Gamma_2] = 1.32M$$