

Άσκηση E3 (Βιβλίου)

a. Να γράψετε τα ισοζύγια μάζας σε αδιαστατοποιημένη μορφή:

Ορίζουμε ως όγκο ελέγχου τον όγκο V του αντιδραστήρα.

Γράφουμε το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό A:

$$\frac{d(V[A])}{dt} = F_V[A_{ΕΙΣ}] - F_V[A_{ΕΞΟΔ}] + r_1V - r_2V$$

- ✓ Επειδή έχουμε αντιδραστήρα Batch (διαλείποντος έργου) οι όροι εισόδου και εξόδου είναι ίσοι με μηδέν!

$$V \frac{d[A]}{dt} = r_1V - r_2V$$

- ✓ Θεωρώντας την πυκνότητα σταθερή, μπορούμε να απλοποιήσουμε τον όγκο V !

$$\frac{d[A]}{dt} = k_1[A] - k_2[A][B^2] \quad [1]$$

Γράφουμε το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό B:

$$\frac{d(V[B])}{dt} = F_V[B_{ΕΙΣ}] - F_V[B_{ΕΞΟΔ}] + r_2V - r_3V$$

- ✓ Ισχύουν οι ίδιες παραδοχές!

$$V \frac{d[B]}{dt} = r_2V - r_3V$$

$$\frac{d[B]}{dt} = k_2[A][B^2] - k_3[B] \quad [2]$$

Για να αδιαστατοποιήσουμε τα ισοζύγια μάζας των συστατικών A και B, θα διαιρέσουμε με $k_1[A_0]$ τις σχέσεις [1] και [2]:

$$\frac{d \frac{[A]}{[A_0]}}{d(k_1 t)} = \frac{k_1 [A]}{k_1 [A_0]} - \frac{k_2 [A][B^2][A_0^2]}{k_1 [A_0][A_0^2]}$$

$$\frac{d \frac{[B]}{[A_0]}}{d(k_1 t)} = \frac{k_2 [A][B^2][A_0^2]}{k_1 [A_0][A_0^2]} - \frac{k_3 [B]}{k_1 [A_0]}$$

Στην συνέχεια ορίζουμε τις εξής αδιάστατες μεταβλητές:

$$C_A = [A]/[A_0] \quad C_B = [B]/[A_0] \quad k_1 t = \tau \quad \Phi_1 = (k_2 [A_0])/k_1 \quad \Phi_2 = k_3/k_1$$

Όποτε χρησιμοποιώντας τις παραπάνω μεταβλητές τα ισοζύγια γράφονται στην μορφή:

$$\frac{dC_A}{d\tau} = C_A - \Phi_1 C_A C_B^2$$

$$\frac{dC_B}{d\tau} = \Phi_1 C_A C_B^2 - \Phi_2 C_B$$

Σύμφωνα με τα δεδομένα της άσκησης τελικά $\Phi_1 = \Phi_2 = 1$

b. Για να βρούμε την μόνιμη κατάσταση εξισώνουμε τα $d()/d\tau$ με το μηδέν:

$$\frac{dC_A}{d\tau} = 0$$

$$\frac{dC_B}{d\tau} = 0$$

Λύνουμε σαν σύστημα:

$$C_A - C_A C_B^2 = 0$$

$$C_A C_B^2 - C_B = 0$$

Συνεπώς, οι μόνιμες καταστάσεις είναι:

- i. $(C_A, C_B) = (0, 0)$
- ii. $(C_A, C_B) = (1, 1)$