

Προσομοίωση & Βελτιστοποίηση Βιομηχανικών Διεργασιών

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank
Reaction - CFSTR

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

Ταξινόμηση χημικών αντιδραστηρίων

Ως προς τον τρόπο λειτουργίας

- Συνεχής (continuous)
- Ασυνεχής/διαλείποντος έργου (batch)
- Ημιδιαλείποντος έργου

Ως προς τα πρότυπα ροής και ανάμιξης

- Τέλεια ανάμειξη
- Εμβολικής Ροής

Ως προς τον αριθμό των φάσεων

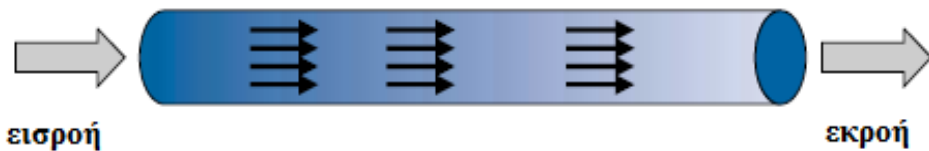
- Ομογενείς αντιδραστήρας (μια φάση)
- Ετερογενείς αντιδραστήρας (τουλάχιστον 2 φάσεις)

Τύποι Αντιδραστηρίων



Ασυνεχής αντιδραστήρας
Αυτοτελούς (διαλείποντος) έργου

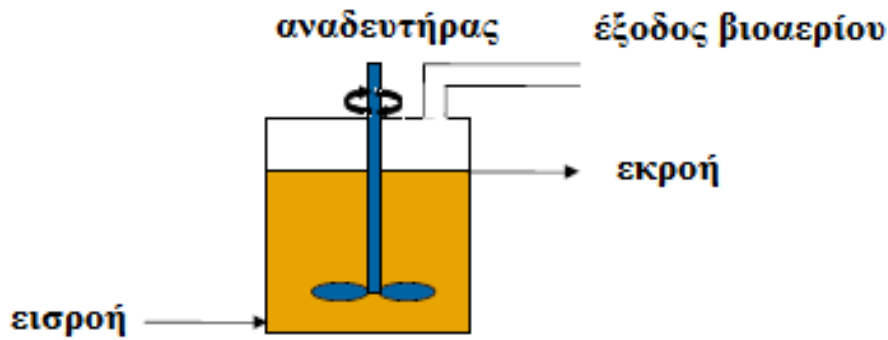
Αντιδραστήρας εφάπαξ
πλήρωσης ή διαλείποντος
έργου (Batch reactor)



Συνεχής αντιδραστήρας
Εμβόλιμης ροής
Ροή: συνεχής, στρωτή, ομοιόμορφη
Συγκέντρωση: μεταβάλλεται κατά
μήκος του αντιδραστήρα

Αντιδραστήρας εμβολικής ροής
(Plug-flow reactor)

Τύποι Αντιδραστηρίων



Συνεχής αντιδραστήρας
Πλήρης ροής
Ροή: συνεχής, συνθήκες τέλει
ανάδευσης
Συγκέντρωση: ομοιογενείς σε όλο τον
αντιδραστήρα

**Αντιδραστήρας συνεχούς ανάδευσης
(Continuously stirred tank reactor -CSTR)**

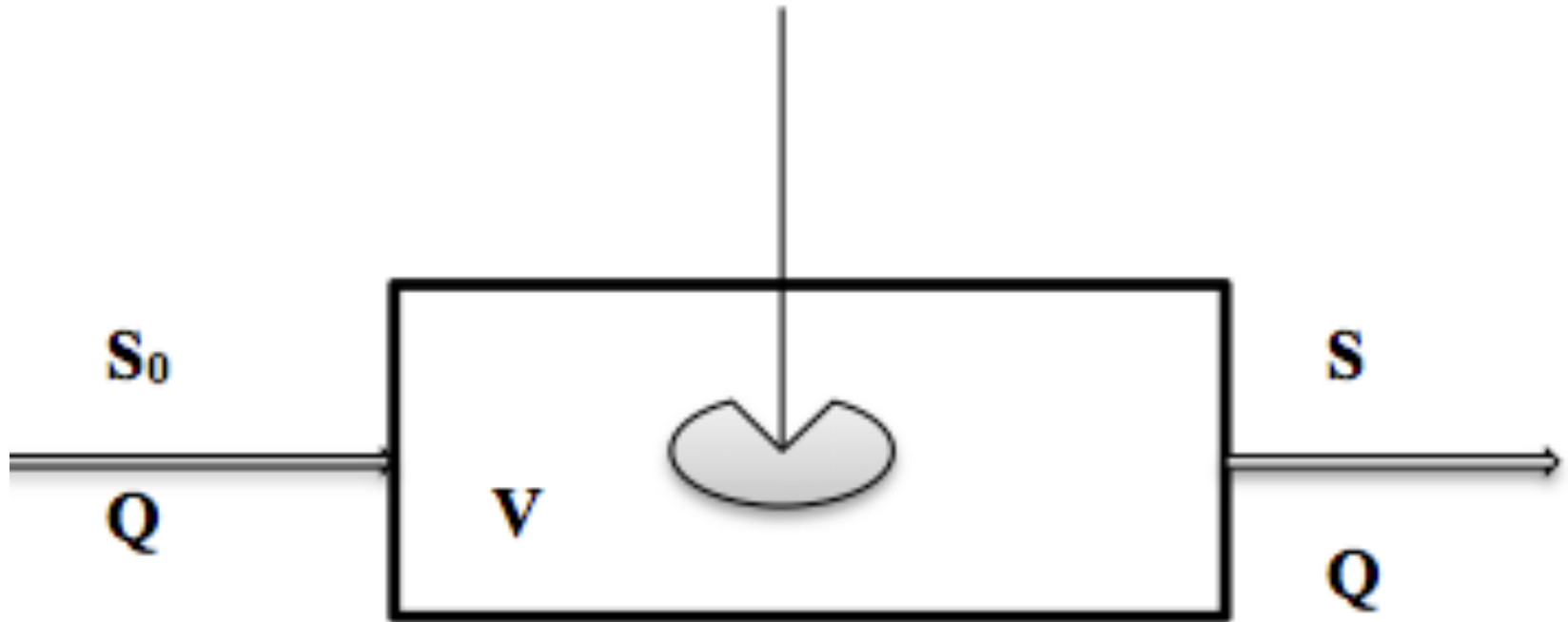
Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

Σύμφωνα με το πρώτο θερμοδυναμικό αξίωμα η ύλη δεν είναι δυνατόν να δημιουργηθεί ούτε να καταστραφεί, μπορεί απλά να μετατραπεί από μια μορφή στην άλλη

Αν σε ένα ομοιογενή αντιδραστήρα CFSTR γίνεται η μετατροπή $A \rightarrow B$ και S_0 είναι η συγκέντρωση της πρώτης ύλης A στην είσοδο, τότε η μάζα της πρώτης ύλης A που εισέρχεται στο σύστημα είναι $Q S_0$

•Όπου **Q η ογκομετρική παροχή** η οποία είναι ίδια και στην έξοδο αν θέλουμε να παραμένει ο όγκος του διαλύματος στον CFSTR σταθερός

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR



Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

- Η μάζα της πρώτης ύλης που εξέρχεται από το σύστημα είναι $Q S$
- όπου S η συγκέντρωση τόσο στην έξοδο όσο και στην κυρίως μάζα του διαλύματος αφού έχουμε πλήρη ανάδευση
- Αν ο ρυθμός μετατροπής του A σε B είναι r_s τότε η κατανάλωση της μάζας του A είναι $r_s V$
Όπου V ο σταθερός όγκος του διαλύματος

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

Η συσσώρευση ή η αποσυσσώρευση του A στον αντιδραστήρα είναι $\frac{dS}{dt}V$

Σύμφωνα με την ταυτότητα του ισοζυγίου των υλικών που ισχύει σε κάθε κλειστό σύστημα, όπου υπάρχει εισροή και εκροή έχουμε:

$$\text{Συσσώρευση} = \text{Εισροή} - \text{Εκροή} + \text{Παραγωγή} - \text{Κατανάλωση}$$

Αν η παραγωγή και η κατανάλωση του εξεταζόμενου συστήματος είναι μηδέν τότε

$$\text{Συσσώρευση} = \text{Εισροή} - \text{Εκροή}$$

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

Συσσώρευση = Εισροή – Εκροή

$$\frac{dS}{dt}V = QS_0 - QS$$

$$\frac{dS}{dt}V = QS_0 - QS \implies \frac{dS}{S_0 - S} = \frac{Q}{V}dt \implies$$

$$-\int_{S_a}^S \frac{d(S_0 - S)}{(S_0 - S)} = \frac{Q}{V} \int_0^t dt \implies \ln(S_0 - S) - \ln(S_0 - S_a) = -\frac{Q}{V}t \implies$$

$$\ln(S_0 - S) = \ln(S_0 - S_a) + \left(-\frac{Q}{V}\right)t \implies \ln \frac{S_0 - S}{S_0 - S_a} = -\frac{Q}{V}t \implies \frac{S_0 - S}{S_0 - S_a} = e^{-\frac{Q}{V}t} \implies$$

$$S_0 - S = (S_0 - S_a)e^{-\frac{Q}{V}t} \implies S = S_0 - (S_0 - S_a)e^{-\frac{Q}{V}t}$$

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

Όταν : $t = 0$

$S = S_a =$ αρχική συγκέντρωση

Όταν : $t = \infty$

$S = S_0 =$ συγκέντρωση βρύσης

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

Για συνθήκες σταθεροποιημένης κατάστασης για το ισοζύγιο μάζας

$$\frac{dS}{dt}V = Q_0S_0 - Q_0S + r_sV \quad \text{έχουμε} \quad \frac{dS}{dt} = 0$$

$$Q_0S_0 = Q_0S + kSV \implies Q_0S_0 = S(Q_0 + kV) \implies$$

$$\frac{S}{S_0} = \frac{Q_0}{Q_0 + kV} \implies \frac{S_e}{S_0} = \frac{1}{1 + kt}$$

$$\text{Όπου } t = Q = \frac{V}{Q_0}, \quad S_e = S$$

Προσομοίωση Continuous Feed Stirred Tank Reaction - CFSTR

Προκειμένου να μελετηθεί μια λίμνη ως προς την ομοιογένεια προσομοιάζεται με CFSTR και οι τιμές των παραμέτρων εκτιμώνται σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση

$$\ln(S - S_0) = \ln(S_a - S_0) - \frac{Q}{V_\lambda} t$$

Όπου **V_λ** ο **ιδανικός χρόνος λειτουργίας** που αντιστοιχεί σε συνθήκες πλήρους ομοιογένειας