

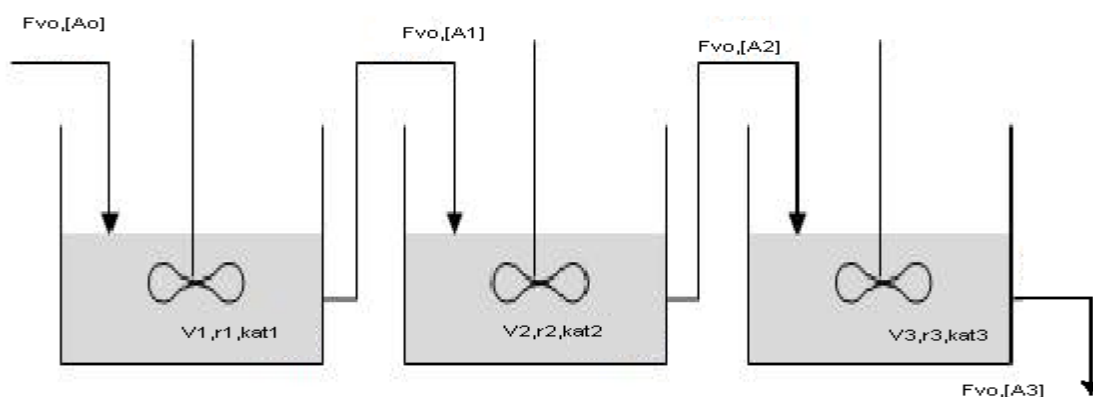
# Βελτιστοποίηση απόδοσης συστοιχίας σε σειρά αντιδραστήρων CSTR

Μαρίνα-Παρασκευή Πετροπούλου<sup>1</sup>, Κωνσταντίνος Βαγενάς<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, 26504, Πάτρα

<sup>2</sup>Ακαδημία Αθηνών, Πανεπιστημίου 28, 10679, Αθήνα

Ο σκοπός της παρούσας μελέτης είναι η βελτιστοποίηση της απόδοσης συστοιχίας τριών αντιδραστήρων CSTR σε σειρά, καθένας από τους οποίους περιέχει διαφορετικό καταλύτη και συνεπώς διαφορετικό ρυθμό αντίδρασης. Η συστοιχία σε σειρά είναι η διάταξη που παρατίθεται στο Σχήμα 1.



Σχήμα 1: Συστοιχία σε σειρά τριών αντιδραστήρων CSTR.

Θεωρήθηκε ότι δεν υπάρχουν μεταβολές πυκνότητας, ενώ η αντίδραση που λαμβάνει χώρα είναι του τύπου  $A \rightarrow B$ . Λόγω των διαφορετικών καταλυτών σε κάθε αντιδραστήρα υπάρχει και διαφορετικός ρυθμός αντίδρασης. Επιλέχθηκαν οι παρακάτω ρυθμοί:

$$r = k \cdot [A] \rightarrow r = k \cdot [Ao] \cdot (1-x) \quad 1^{\text{ης}} \text{ τάξης}$$

$$r = k \cdot [A]^2 \rightarrow r = k \cdot [Ao]^2 \cdot (1-x)^2 \quad 2^{\text{ης}} \text{ τάξης}$$

$$r = k \cdot [A]^{1/2} \rightarrow r = k \cdot \{[Ao] \cdot (1-x)\}^{1/2} \quad 3^{\text{ης}} \text{ τάξης}$$

οι οποίοι εναλλάσσονται στους τρεις αντιδραστήρες.

Για να αλλάξει η απόδοση του συστήματος των αντιδραστήρων θα πρέπει είτε να τροποποιηθεί η σειρά τους είτε να αλλάξει η θερμοκρασία που επιβάλλεται στον καθένα. Μία άλλη περίπτωση θα μπορούσε να είναι η αλλαγή των όγκων των αντιδραστήρων ή των παροχών κάτι που θα έκανε το πρόβλημα αρκετά πιο περίπλοκο. Στη συγκεκριμένη εργασία θεωρήθηκε ισοθερμοκρασιακό σύστημα χωρίς μεταβολή όγκου ή παροχής.

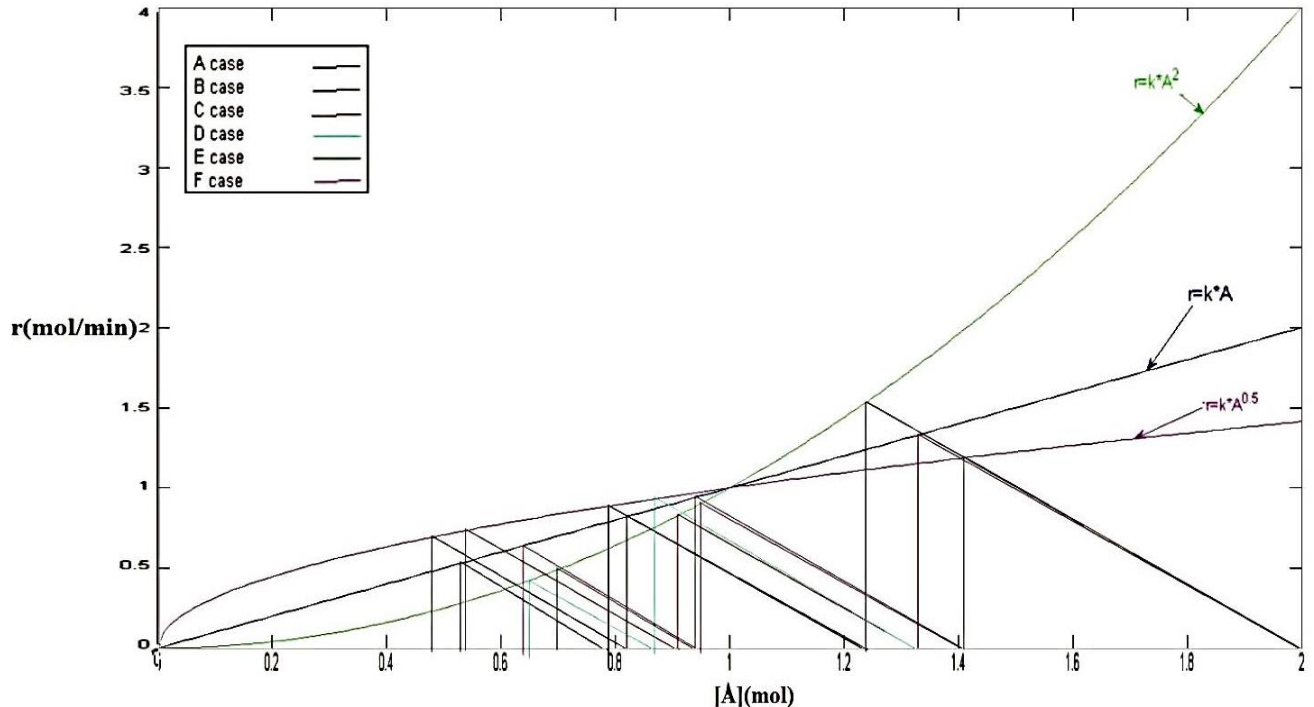
Στον Πίνακα 1 η πρώτη στήλη περιέχει την εκάστοτε περίπτωση της συστοιχίας καθώς και τη σειρά των ρυθμών αντίδρασης σε αυτή (πχ. A(2,1,1/2): περίπτωση A με 2<sup>ης</sup>

τάξης αντίδραση στον πρώτο αντιδραστήρα,  $1^{ηs}$  στο δεύτερο και  $1/2^{ηs}$  στον τρίτο). Στην  $2^{η}$  στήλη παρατίθενται τα ποσοτικά αποτελέσματα της απόδοσης για την κάθε περίπτωση. Για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων του Πίνακα 1 χρησιμοποιήθηκε η εξίσωση σχεδιασμού για τους CSTR :  $F_{v0} \cdot [A_0] - F_v \cdot [A] = r \cdot V$  (Αριθμητική επίλυση).

**Πίνακας 1: Η απόδοση της κάθε συστοιχίας.**

Συστοιχία	Απόδοση $[\frac{A_0 - A_3}{A_0}] \%$
A(2,1,1/2)	76.1
B(2,1/2,1)	73.7
Γ(1,2,1/2)	72.8
Δ(1,1/2,2)	67.3
E(1/2,1,2)	65.2
ΣΤ(1/2,2,1)	68.3

Η βέλτιστη συστοιχία βρέθηκε να είναι η Α κάτι που επαληθεύτηκε και από τη γεωμετρική επίλυση του προβλήματος η οποία φαίνεται στο Σχήμα 2. Αξίζει να σημειωθεί, πως οι μεγαλύτερες αποδόσεις παρατηρήθηκαν στις συστοιχίες όπου ο καταλύτης που δίνει μεγαλύτερη τάξη αντίδρασης τοποθετείται όσο το δυνατόν πιο κοντά στην αρχή της συστοιχίας.



Σχήμα 2: Διάγραμμα ρυθμών αντίδρασης συναρτήσει της συγκέντρωσης  $[A]$  για όλες τις περιπτώσεις μαζί.