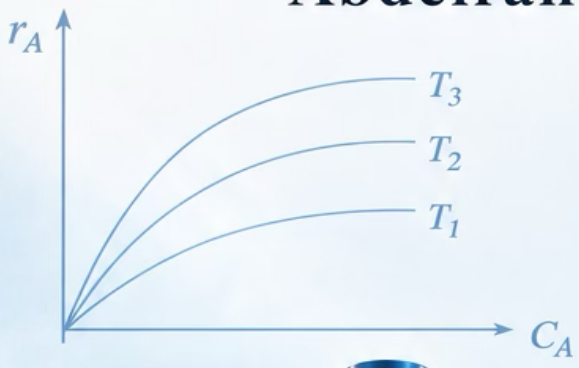
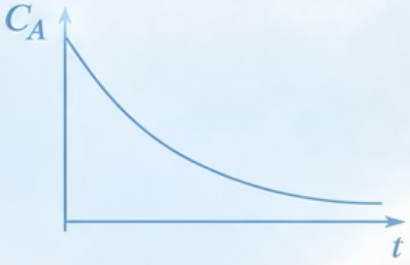
CHEMICAL REACTION 1

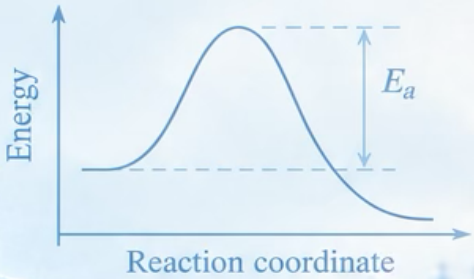
Abdelrahman Abu Hammor



$$r_A = kC_A^n$$



$$A \longrightarrow B + C$$



Rate Law

Topic 2

مقدمة بشكل عام عن المواضيع الي رح نحكي عنها لقدام بالتفصيل

1) Types of reactions (Homogeneous, Heterogeneous, Irreversible, Reversible)
2) Rate law and reaction rates
3) Reaction rate constant (k_f) and Arrhenius equation (Activation energy)
4) Reaction order and units of reaction constants
5) Key reactant and reaction conversion (X)
6) Extent of reaction ξ
7) General mole balance equation
8) Types of reactors
   #Batch reactor
   #Continuous-Stirred Tank Reactor (CSTR)
   #Tubular Reactor / Plug Flow Reactor (PFR)
   #Packed-Bed Reactor (PBR)

Types of Reactions

Homogeneous Reaction: Involves one phase

Heterogeneous Reaction: In multiple phases, a reaction usually occurs at the interface between phases

Irreversible Reaction: Proceeds in only one direction and continues in that direction until the reactants are exhausted

$$A \longrightarrow B$$

Reversible Reaction: Can proceed in either direction, depending on the concentrations of reactants and products present relative to the corresponding equilibrium constants

$$A \rightleftharpoons B$$

Rate Law

$$a\,A + b\,B \leftrightarrow c\,C + d\,D$$

$$-\frac{1}{a}\frac{dN_A}{dt} = -\frac{1}{b}\frac{dN_B}{dt} = +\frac{1}{c}\frac{dN_C}{dt} = +\frac{1}{d}\frac{dN_D}{dt}$$

الإشارة السالبة للمتفاعلات، والإشارة الموجبة للنواتج، وبقسم كل مادة على معاملها ليتساوى الجميع

$$r_i = \frac{1}{V}\frac{dN_i}{dt} = \frac{\text{moles formed}}{(\text{volume of fluid})(\text{time})}$$

$$R = \frac{\Delta C}{\Delta t}$$

الـ Rate هو معدل تغير التراكيز بالنسبة للزمن

$C_o = 100 \quad C = 80$

$t = 0 \quad t = 5\ min$

$$R = \frac{20}{5} = 4\ \frac{mole}{min}$$

$$R_A = -\frac{dC_A}{dt}$$
$$R_B = -\frac{dC_B}{dt}$$
$$R_C = +\frac{dC_C}{dt}$$
$$R_D = +\frac{dC_D}{dt}$$

كل ما كان الـ Concentration عالي ↑ Rate الـ يكون

Reaction rate constant (k_f) and Arrhenius equation (Activation energy)

$$k_f(T) = Ae^{-E/RT}$$

$k_f(T)$ is the reaction rate constant:

Species specific, therefore subscripted to reflect which species constant is making reference

$$-r_A = k_f(T)\, f(C_A, C_B, C_C, C_D, \ldots)$$

function on temperature only.

NOT really a constant, but is not a function of concentrations

Described by kinetic theory of gases

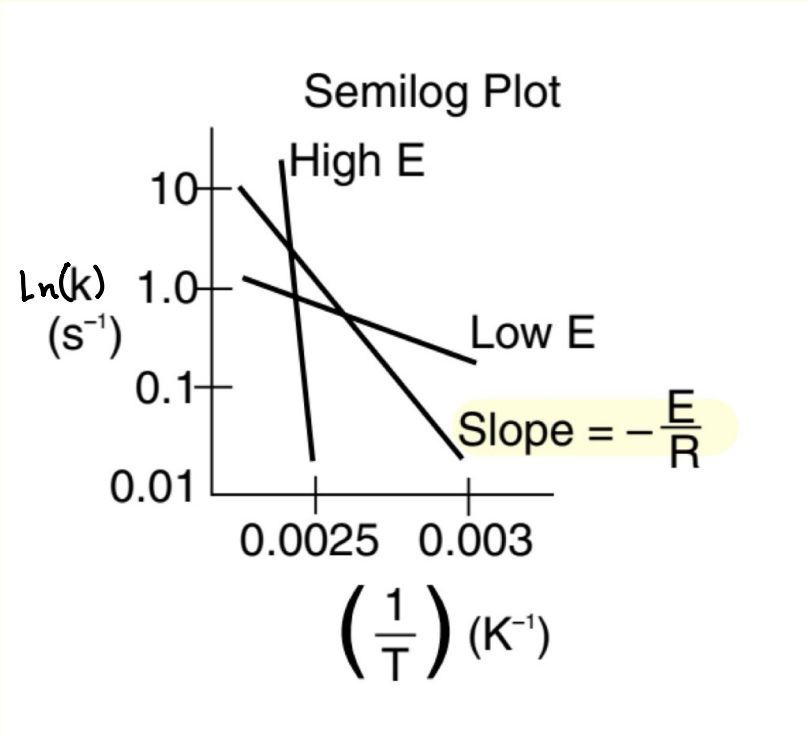
$$k_f(T) = Ae^{-E/RT}$$

A = pre-exponential factor (frequency factor)
E = activation energy (J/mol)
R = gas constant (8.314 J/mol K, 1.987 cal/mol K)
T = absolute temperature (K)

Activation Energy "E"

$$\ln(k) = \ln(A) - \frac{E}{R}\left(\frac{1}{T}\right)$$

y محور — intercept — Slope — x محور



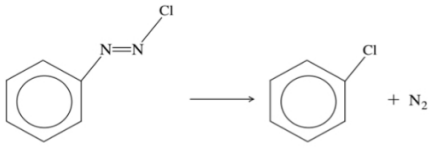
كلما زادت قيمة (E) زاد الـ Slope مما يجعل ثابت سرعة التفاعل (K) أكثر حساسية مع أي تغيير في درجة الحرارة

وعليه الميل $= -\frac{E}{R}$ ، كلما زادت E زاد الـ Slope

Constant ← R

Example 2.1 Determination of the Activation Energy

Calculate the activation energy for the decomposition of benzene diazonium chloride to give chlorobenzene and nitrogen



k (s^{-1})	0.00043	0.00103	0.00180	0.00355	0.00717
T (K)	313.0	319.0	323.0	328.0	333.0

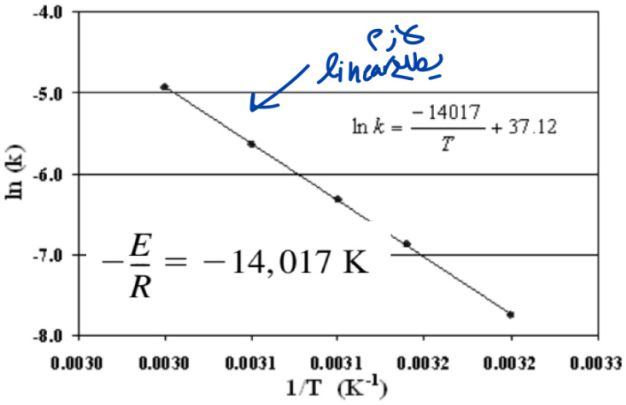
Solution

$$\ln k_A = \ln A - \frac{E}{R}\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$E = (14{,}017\ \text{K})R = (14{,}017\ \text{K})\left(8.314\ \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}\right)$$

$$E = 116.5\ \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$k = 1.32\times 10^{16}\ exp\left[-\frac{14{,}017\ \text{K}}{\text{T}}\right]$$



Key Reactant

$$aA + bB \longrightarrow cC + dD$$

$$A + \frac{b}{a}B \longrightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D$$

خليه معامل A هو واحد.

$$\frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \frac{+r_C}{c} = \frac{+r_D}{d}$$

$A \rightleftharpoons B$ Reversible reaction

max conversion less than 100%

$A \longrightarrow B$ Irreversible reaction

max conversion could be ≈ 100%

Case ① Irreversible, homogenous reaction

لما يكون عندي Irreversible Rxn بيكون عندي بس K_f

$$aA + bB \xrightarrow{K_f} cC + dD$$

$$A + \frac{b}{a}B \longrightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D$$

$$-r_A = \frac{1}{V}\frac{dN_A}{dt} = K_f C_A^a C_B^b$$

Case ② reversible, homogenous

$$aA + bB \overset{K_{equ}}{\rightleftharpoons} cC + dD$$

reaction rate respect to A (Key)

$$-r_A = \frac{1}{V}\frac{dN_A}{dt} = K_f C_A^a C_B^b - K_B C_C^c C_D^d$$

$$K_{equ} = \frac{K_f}{K_B} = \frac{C^P}{C^R} = \frac{\text{Concentration of products}}{\text{Concentration of reactants}}$$

$$aA + bB \overset{K_{equ}}{\rightleftharpoons} cC + dD$$

At equilibrium

$$r_A = r_B = r_C = r_D = 0$$

$$K_{equ} = \frac{K_f}{K_b} = \frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b}$$

لما تقل قيمة K_{equ} ↓ تزداد قيمة K_b فالتفاعل يتجه نحو اليسار نحو المتفاعلات

$$K_{equ} = \frac{K_f}{K_b} = \frac{A_f}{A_b} e^{\frac{-[E_{Af} - E_{AB}]}{RT}}$$

لمصلحتي قيمة K_{equ} تكون عالية

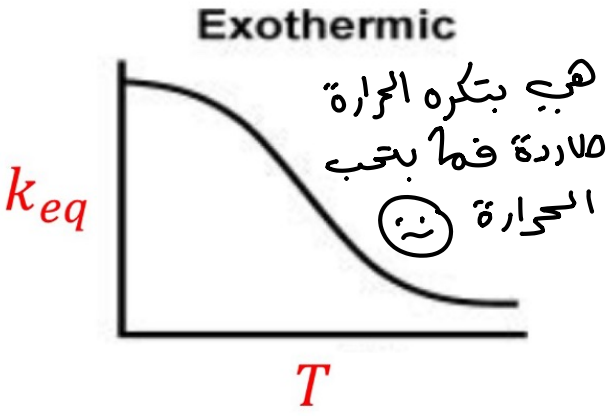
$e^{\frac{-[E_{Af} - E_{AB}]}{RT}}$ ⟹ لمصلحتي تكون قيمته max وهذا بدا فيه بالبسط

* $(E_f - E_b)$ min
* RT max

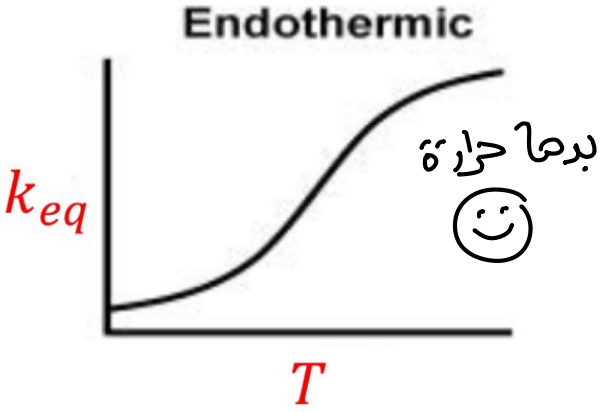
AS K_{equ} ↑ → $K_f \gg K_b$ → product, Rate ↑

I need K_{equ} ↑

التفاعلات الطاردة للحرارة Exothermic
يقل ثابت الاتزان Kequ كلما ارتفعت الحرارة



التفاعلات الماصة للحرارة Endothermic
يزداد ثابت الاتزان Kequ كلما ارتفعت الحرارة



$$K_{eq}(T) = K_{eq}(T_1)\exp\left[\frac{\Delta H^{\circ}_{Rx}}{R}\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T}\right)\right]$$

هاي لقدام رح نشتغل عليها بمادة الفاينل

Reaction Order

$-r_A = K C_A^{\alpha} C_B^{\beta}$

order in A = α
order in B = β
Overall order = $\alpha+\beta$

يسمى elemintary
الـ non
مش مهمنا

Unit of reaction constant

$A \longrightarrow$ Products

$\{-r_A\} = [\text{concentration/time}]$

$\{K\} = \dfrac{[\text{concentration}]^{1-n}}{\text{time}}$

وحدة K حسب الـ order تبع الـ RXN
يعني مش ثابتة

Zero order ($n=0$)	$-r_A = K$	$\{K\} = \dfrac{mol}{dm^3 \cdot s}$
first order ($n=1$)	$-r_A = KC_A$	$\{K\} = s^{-1}$
Second order ($n=2$)	$-r_A = KC_A^2$	$\{K\} = \dfrac{dm^3}{mol \cdot s}$
third order ($n=3$)	$-r_A = KC_A^3$	$\{K\} = \dfrac{dm^6}{mol^2 \cdot s}$

Conversion (x)

هو النسبة من المادة المتفاعلة الأصلية التي تفاعلت وتحولت إلى نواتج.

قيمة بدون وحدة، ومحصورة دائماً بين 0 و 1 (أو من 0% إلى 100%).

$$x_A = \frac{\text{Moles of A reacted}}{\text{Moles of A fed (initial)}} = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0}} \qquad dx_A = \frac{-dN_A}{N_{A,0}}$$

ليش فيه سالب؟ لأن NA (كمية المادة المتفاعلة) تقل بمرور الوقت، فالتغير فيها (dNA) يكون سالباً. نضع الإشارة السالبة في القانون لكي تصبح قيمة الـ x

حساب عدد مولات أي مادة باستخدام الـ Conversion (x)

$$aA + bB \rightarrow cC + dD$$

Species	initially	Change	Remaining
A	N_{A_0}	$-(N_{A_0}X)$	$N_A = N_{A_0} - N_{A_0}X$
B	N_{B_0}	$-\frac{b}{a}(N_{A_0}X)$	$N_B = N_{B_0} - \frac{b}{a}N_{A_0}X$
C	N_{C_0}	$+\frac{c}{a}(N_{A_0}X)$	$N_C = N_{C_0} + \frac{c}{a}N_{A_0}X$
D	N_{D_0}	$+\frac{d}{a}(N_{A_0}X)$	$N_D = N_{D_0} + \frac{d}{a}N_{A_0}X$

$N_T = N_{T_0}\left(\frac{d}{a}+\frac{c}{a}-\frac{b}{a}-1\right)N_{A_0}X$

δ

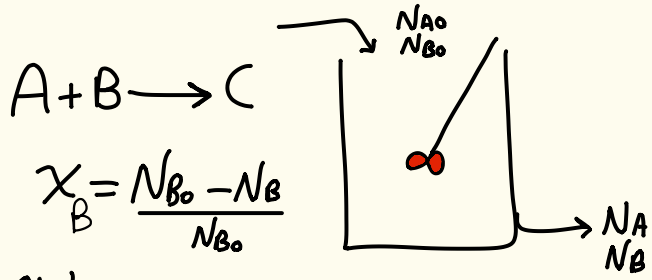
أحسب اني تكون ΠN_T

عندي Two options

يا بزيد هاي أو هاك

N_{A_0} بدخل بتركيز عالي

المعرف من Key component خليتهم كلهم بدلالة الـ A



$$X_B = \frac{N_{B_0} - N_B}{N_{B_0}}$$

$$XN_{B_0} = N_{B_0} - N_B$$

$$N_B = N_{B_0} - XN_{B_0}$$

N_B الموولات المتبقية — N_{B_0} الموولات الإبتدائية — XN_{B_0} اللي تفاعلت "Change"

$$N_A = N_{A,0} - N_{A,0}x$$

$$N_B = N_{B,0} - \frac{b}{a}N_{A,0}x$$

$$N_C = N_{C,0} + \frac{c}{a}N_{A,0}x$$

$$N_D = N_{D,0} + \frac{d}{a}N_{A,0}x$$

الـ Conversion بيعتمد على المادة وكميتها الابتدائية ومعاملها

$$0 \le \xi \le n_A^o/a \text{ and } 0 \le \chi \le 1$$

Extent

يُمثّل درجة تقدم التفاعل الكيميائي، ويُعبر عنه بعدد المولات الكلية (Stoichiometric coefficients) التي تفاعلت أو تكونت وفقاً لمعادلة التفاعل الموزونة.

ثابتة ولا تتغير بتغير المادة داخل نفس التفاعل.

سواء نظرت إلى المادة المتفاعلة A، أو المتفاعلة B, أو الناتجة C، فإن قيمتها تظل ثابتة لا تتغير.

$$\xi = \frac{N_i - N_{i,0}}{\nu_i}$$

Where Ni is the current moles, Ni,o is the initial moles, and. ν_i is the stoichiometric coefficient.

$$N_A = N_{Ao} - \xi$$

$$N_B = N_{Bo} - b\,\xi$$

$$N_C = N_{Co} + c\,\xi$$

$$N_D = N_{Do} + d\,\xi$$

Calculating Moles at Any Time:

$$N_i = N_{i,0} + \nu_i \xi$$

This can also be written in terms of a molar flow as, $\dot{n}_i = \dot{n}_{i,0} + \nu_i \xi$

Note: ν_i is negative for reactants and positive for products

Relationship with Conversion (x):

$$\xi = \frac{N_{A,0} \cdot x}{\nu_{key}}$$

Where x is the fractional conversion of the key reactant, and ν_{key} is its stoichiometric coefficient.

Example

$$A + 2B \longrightarrow 3C \qquad \xi = 4 \text{ mol}$$

$N_{A0} = 10\,mol$

$N_{B0} = 20\,mol$

$N_{C0} = 0\,mol$

$$N_A = N_{A,0} + \nu_A \xi = 10 - (1 \times 4) = 6 \text{ mol}$$

$$N_B = N_{B,0} + \nu_B \xi = 20 - (2 \times 4) = 12 \text{ mol}$$

$$N_C = N_{C,0} + \nu_C \xi = 0 + (3 \times 4) = 12 \text{ mol}$$

كيف نحسب الـ Conversion (X)؟

$$X_A = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0}} = \frac{10 - 6}{10} = \frac{4}{10} = 0.4 \ (\ 40\%)$$

الربط بينهما بالأرقام:

$$\xi = \frac{N_{A,0} \cdot X_A}{\nu_{\text{key}}}$$

$$\xi = \frac{10 \times 0.4}{1} = 4 \text{ mol}$$

General mole balance equation

$$In - out + gen = Acc$$

$$F_0 - F + G = \frac{dN}{dt}$$

$$\frac{mol}{time} \quad \frac{mol}{time} \quad \frac{mol}{time} = \frac{mol}{time}$$

$G = \int r\,dV$

$G = r\,V$

معزوب بـ Volume كان وحدة الـ gen $= \frac{mol}{time \cdot Volume}$

#Batch reactor
#Continuous-Stirred Tank Reactor (CSTR)
#Tubular Reactor / Plug Flow Reactor (PFR)
#Packed-Bed Reactor (PBR)

بناءاً على G.B.E
رح نوجد قانون
كل Reactor

* Batch Reactor

الـ batch مفيش اجي بيدخل
وبيطلع كـ flow, مرة وحدة بيدخل
على Reactor وبس يخلص الـ RXN
بيطلع



هو نظام تفاعل كيميائي يتم فيه وضع كمية محددة من المواد المتفاعلة داخل الوعاء مرة واحدة في البداية (Zero inflow and outflow)، ويترك التفاعل ليحدث لفترة زمنية محددة مع التقليب المستمر، ثم يتم تفريغ المنتج النهائي بالكامل.

$$F_{j0} - F_j + \int^V r_j \, dV = \frac{dN_j}{dt}$$

لهذا السبب يتم شطب (Cancel) حدي الدخول والخروج في الصورة، وتصبح المعادلة:

$$\frac{dN_j}{dt} = \int^V r_j \, dV$$

إذا كان الخليط ممزوجاً بشكل مثالي ومستمر، فهذا يعني أن سرعة التفاعل (r_j) تكون متساوية وثابتة في كل نقطة داخل حجم المفاعل (V).

وبناءً عليه، يمكننا إخراج سرعة التفاعل (r_j) خارج علامة التكامل:

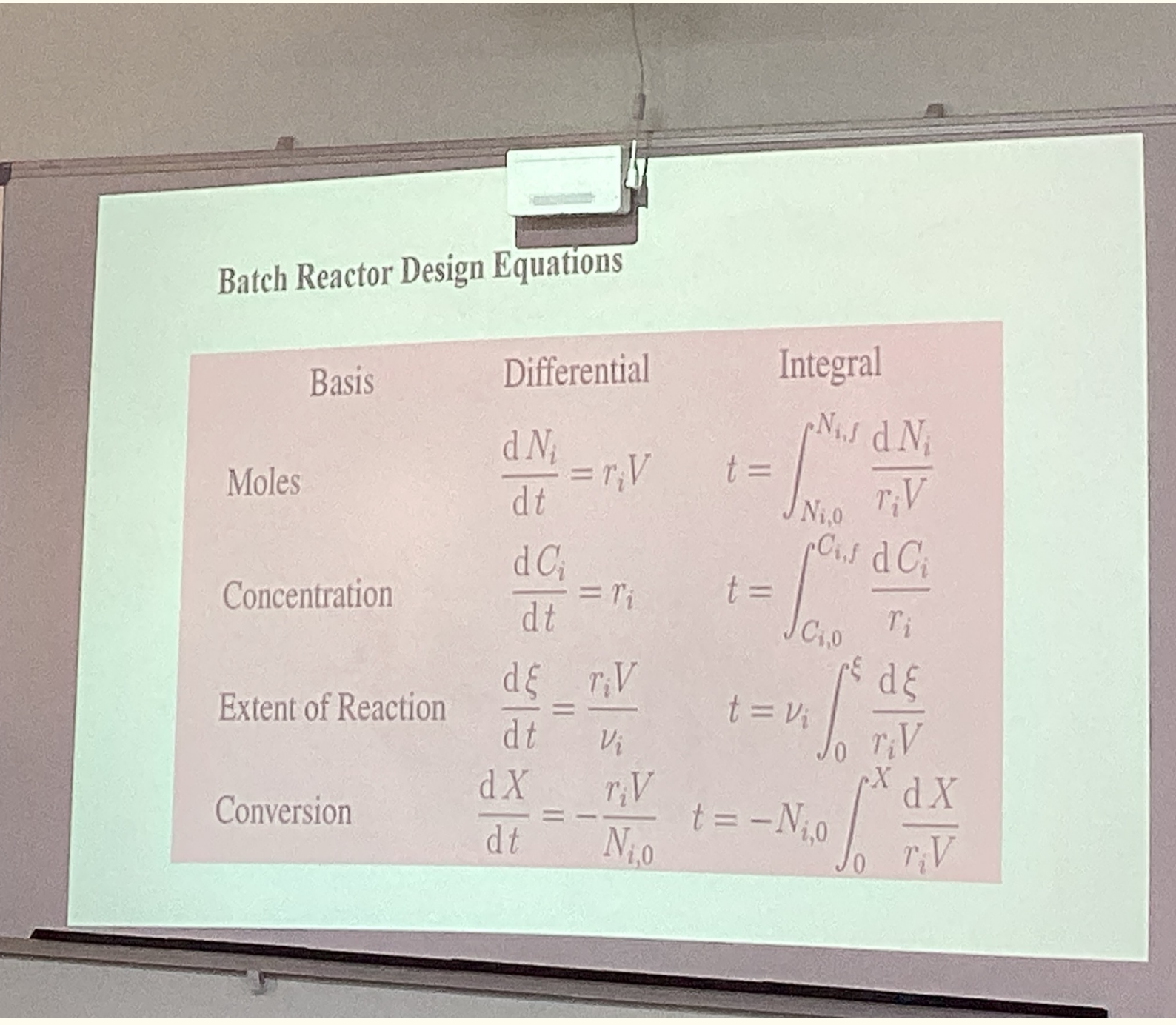
$$\frac{dN_j}{dt} = r_j \int^{V} dV$$

وبما أن تكامل الحجم (dV) من الصفر إلى الحجم الكلي (V) يساوينا V،
تصبح المعادلة المختصرة النهائية في الإطار:

$$\frac{dN_j}{dt} = r_j V$$

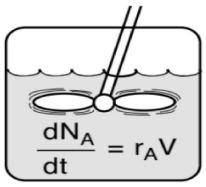
التكامل لحساب زمن التفاعل (t)

$$\int_0^t dt = \int_{N_{j0}}^{N_j} \frac{dN_j}{r_j V}$$



Example 2.5 Estimation of reaction time in batch reactor

consider the isomerization of species *A* in a batch reactor. As the reaction proceeds, the number of moles of *A* decreases, and the number of moles of *B* increases. What is the time needed to decrease the concentration of *A* from N_{Ao} to N_{A1} ?



Batch Reactor

Solution

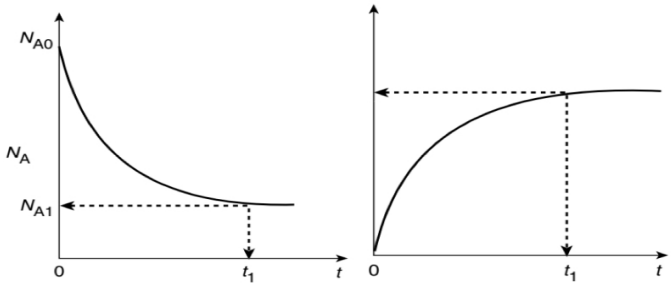
$$A \longrightarrow B$$

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V \quad \Rightarrow \quad dt = \frac{dN_A}{r_A V}$$

$$t_1 = \int_{N_{A1}}^{N_{Ao}} \frac{dN_A}{-r_A V} \qquad t_1 = \int_{N_{A1}}^{N_{Ao}} \frac{dN_A}{kN_A}$$

$$r_A = -\,k\,C_A \quad \Rightarrow \qquad t_1 = \frac{1}{k}\,ln\,\frac{N_{Ao}}{N_{A1}}$$

$$C_A = \frac{N_A}{V}$$



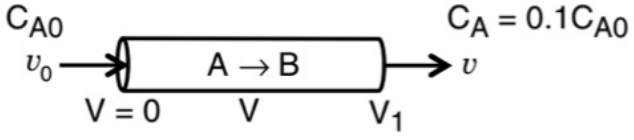
Example 2.5 Sizing of reactors

The bellow reaction is first order in A, $-r_A = k\,C_A$, and is carried out in a tubular reactor in which the volumetric flowrate, $v = 10$ L/min , is constant, i.e., $v_o = v$. What will be the volume of this reactor needed to reduce the initial concentration to 10%?

$k = 0.23\ \text{min}^{-1}$

Solution

$$A \longrightarrow B$$



$$\frac{dF_A}{dV} = r_A \quad \text{and} \quad -r_A = kC_A$$

$$\frac{dF_A}{dV} = \frac{d(C_A v)}{dV} = \frac{d(C_A v_0)}{dV} = v_0\frac{dC_A}{dV} = r_A \quad \Rightarrow \quad -\frac{v_0\,dC_A}{dV} = -r_A = kC_A$$

$$-\frac{v_0}{k}\int_{C_{A0}}^{C_A}\frac{dC_A}{C_A} = \int_0^V dV$$

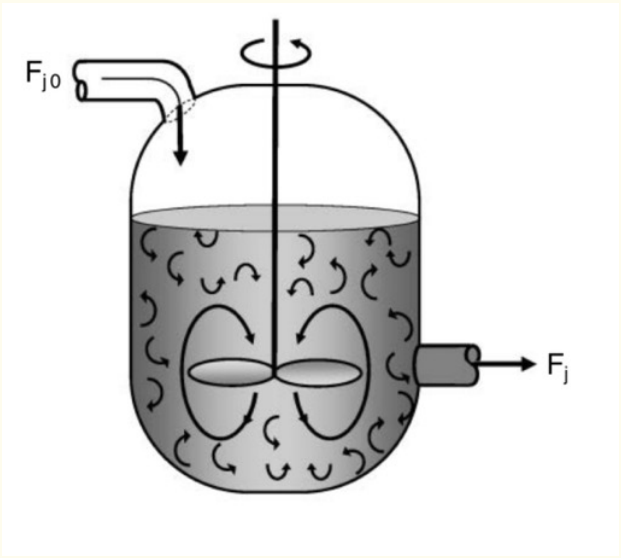
$$\boxed{V = \frac{v_0}{k}\,ln\,\frac{C_{A0}}{C_A}} \quad \Rightarrow \quad V = \frac{10\ \text{dm}^3/\text{min}}{0.23\ \text{min}^{-1}}\ln\frac{C_{A0}}{0.01C_{A0}} = \frac{10\ \text{dm}^3}{0.23}\ln 100 = 200\ \text{dm}^3$$

for packed bed
$v^o \neq v_f$
due to
pressure
drop.

Continuous-Stirred Tank Reactor (CSTR)

#CSTR

Operated at Steady State and constant volume



هو مفاعل مستمر يتميز بأن المواد المتفاعلة تدخل إليه باستمرار وتخرج منه باستمرار، مع وجود خلاط يضمن الخلط التام (Perfect mixing). هذا يعني أن التركيز ودرجة الحرارة ومعدل التفاعل في أي نقطة داخل الخزان هي نفسها عند نقطة الخروج تماماً.

بشكل مستمر عن في flow داخل و flow خارج

اشتقاق معادلة التصميم الأساسية General Mole Balance

$$F_{j0} - F_j + \int^{V} r_j \, dV = \frac{dN_j}{dt}$$

بما أن مفاعل CSTR يعمل في حالة الاستقرار (Steady State)، فهذا يعني أن كمية المادة داخل المفاعل لا تتغير بمرور الوقت، وبالتالي فإن معدل تغير عدد المولات بالنسبة للزمن يساوي صفراً:

$$\frac{dN_j}{dt} = 0$$

وتصبح المعادلة:

$$F_{j0} - F_j + \int^{V} r_j \, dV = 0$$

$$F_j - F_{j0} = \int^{V} (-r_j) \, dV$$

$$\int^{V} r_j \, dV = r_j \cdot V$$

$$F_{j0} - F_j = r_j \cdot V \Longrightarrow V = \frac{F_{j0} - F_j}{-r_j}$$

تطبيق فرضية الخلط التام (Perfect Mixing)

بما أن الخليط ممزوج تماماً، فإن سرعة التفاعل (rj) أو سرعة الاستهلاك (-rj) تكون منتظمة وثابتة في كل حجم المفاعل (V). بناءً على ذلك، يمكن إخراجها خارج التكامل:

ربط معدل التدفق المولي (Fj) بالتركيز (Cj)

$$F_j = C_j \cdot v$$

التدفق الداخل $F_{A0} = C_{A0} \cdot v_0$

التدفق الخارج $F_A = C_A \cdot v$

إذا افترضنا أن السائل غير قابل للانضغاط

No variation of volume

$$V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A}$$

$$V = \frac{f_{A0}\ X}{-r_A}$$

$$V = \frac{vC_{A0} - vC_A}{-r_A}$$

$X = \frac{f_{A0} - f_A}{f_{A0}}$ تذكر

$X f_{A0} = f_{A0} - f_A$

قانون مهم جدًا

رح نستخدمه لقدام بالرسمات

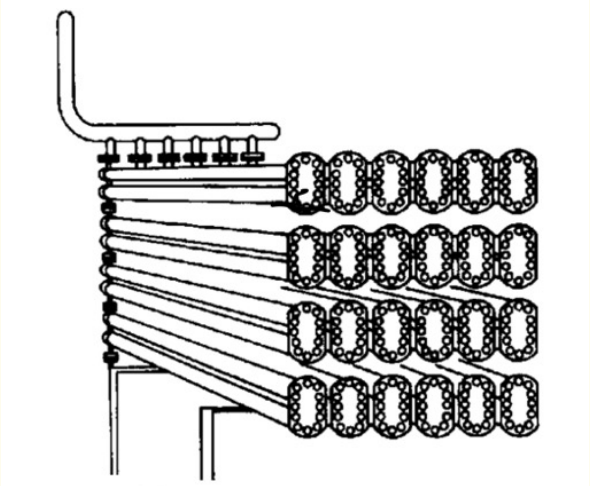
بأخذ v كعامل مشترك وقسمة الطرفين عليه للحصول على زمن البقاء τ

$$\tau = \frac{V}{v_0}$$

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A}$$

Tubular Reactor (PFR)

※ Plug flow Reactor.



هو مفاعل على شكل أنبوب طويل، تدخل المواد المتفاعلة من طرف وتتحرك تدريجياً على شكل شرائح أو دفعات متتالية (Plugs) نحو الطرف الآخر لتخرج كمنتجات

مفاعل مستمر (Continuous)، أي أن المواد تدخل وتخرج باستمرار.

يعمل في حالة الاستقرار Steady State

$$\text{In} - \text{Out} + \text{Generation} = \text{Accumulation}$$

1. الداخل **(In):** معدل دخول المادة j عند بداية الشريحة (V) ويرمز لها بـ $F_j|_V$.
2. الخارج **(Out):** معدل خروج المادة j عند نهاية الشريحة $(V+\Delta V)$ ويرمز لها بـ $F_j|_{V+\Delta V}$.
3. التوليد **(Generation):** كمية المادة الناتجة أو المستهلكة داخل الحجم الصغير وتساوي: معدل التفاعل ضرب الحجم $(r_j \cdot \Delta V)$.
4. التراكم **(Accumulation):** بما أن المفاعل يعمل في حالة الاستقرار (Steady State)، فإن التراكم يساوي صفراً (0).

$$F_j|_V - F_j|_{V+\Delta V} + r_j \Delta V = 0$$

$$\frac{F_j|_{V+\Delta V} - F_j|_V}{\Delta V} = r_j$$

$$\boxed{\frac{dF_j}{dV} = r_j}$$

$$\int_{F_{A0}}^{F_A} dF_A = \int_0^V r_A \, dV \Longrightarrow V = \int_{F_A}^{F_{A0}} \frac{dF_A}{-r_A}$$

يقابله X_A

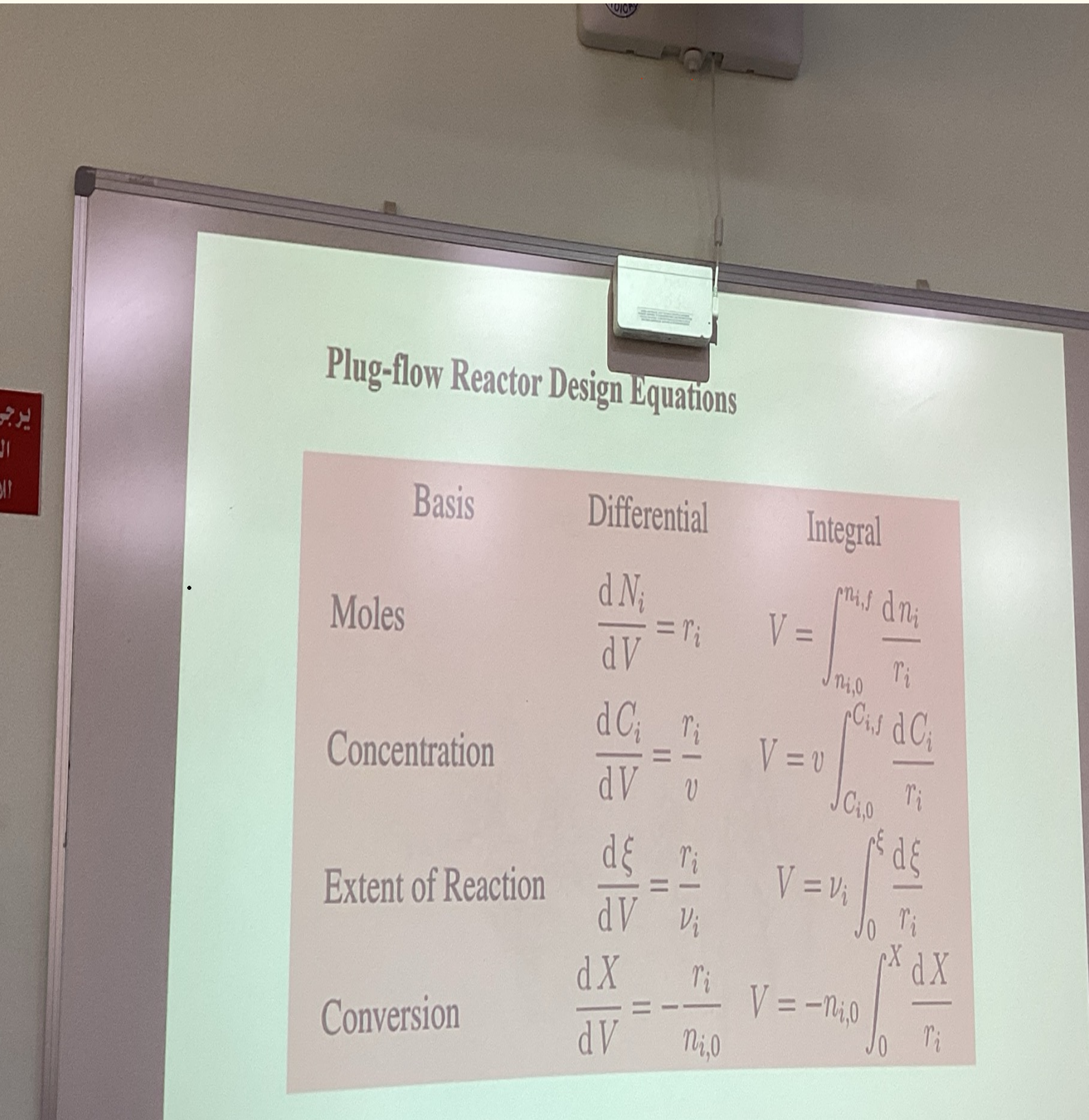
$$V = \frac{d\left(F_{A0}(1-X)\right)}{-r_A}$$

$$= -\frac{F_{A0}\, dX}{-r_A}$$

$$= F_{A0} \int_{0}^{X_A} dX$$

رح يعطيني
سالب وفي سالب بالبسط بتصير ⊕

$$V = \int_{0}^{} \frac{F_{A0}\, dX}{-r_A}$$

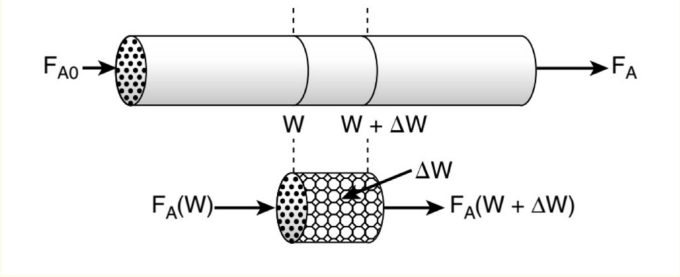


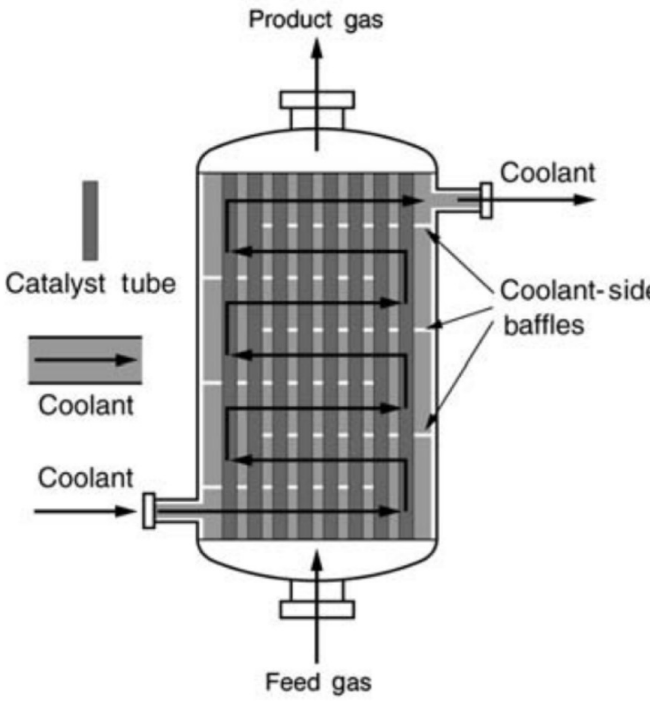
Packed-Bed Reactor (PBR)

بيشبه PFR كتير, هاظ فيه Catalyst

for catalytic RXN !! بيستخدم

أهميته بتزيد الـ Conversion





هو عبارة عن أنبوب يحتوي على حبيبات من العامل المساعد (Catalyst particles) ثابتة في مكانها، بينما تمر المواد المتفاعلة من خلال الفراغات بين هذه الحبيبات لتتفاعل على سطحه

الـ Catalyst بيعمل على زيادة الوقت

يعني زيادة مكوث الـ Reactants داخل الـ Reactor

مفاعل مستمر (Continuous)، المواد تدخل من طرف وتخرج من الطرف الآخر.

نظراً لأن التفاعل يعتمد على العامل المساعد، فإن حجم المفاعل أو الحجم الفعّال لم يعد يُقاس بالحجم V فقط، بل بكتلة العامل المساعد W. (وهذا هو الفرق الرئيسي بينه وبين الـ PFR).

$$\text{In} - \text{Out} + \text{Generation} = \text{Accumulation}$$

1. الداخل **(In)**: معدل دخول المادة عند بداية الشريحة (W) ويرمز لها بـ $F_A|_W$.
2. الخارج **(Out)**: معدل خروج المادة عند نهاية الشريحة $(W + \Delta W)$ ويرمز لها بـ $F_A|_{W+\Delta W}$.
3. التوليد / التفاعل **(Generation)**: هنا سرعة التفاعل لا تعتمد على وحدة الحجم، بل على وحدة كتلة العامل المساعد، وتُكتب بدلالة (r'_A) حيث وحدتها (مول / زمن × كتلة الحفاز). إذن كمية التفاعل في الشريحة هي: $(r'_A \cdot \Delta W)$.
4. التراكم **(Accumulation)**: يساوي صفراً (0) لأن المفاعل يعمل في حالة الاستقرار (Steady State).

$$F_A|_W - F_A|_{W+\Delta W} + r'_A \Delta W = 0$$

$$\frac{F_A|_{W+\Delta W} - F_A|_W}{\Delta W} = r'_A$$

$$\boxed{\frac{dF_A}{dW} = r'_A}$$

التكامل لحساب كتلة ال catalyst الكلية (W)

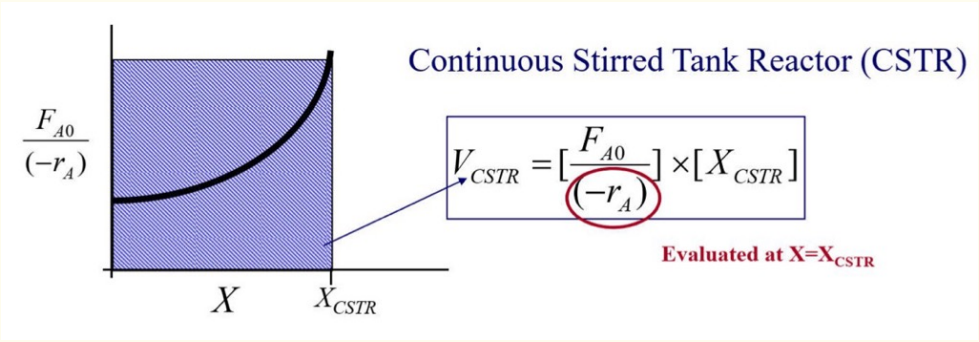
$$\boxed{W = \int_{F_A}^{F_{A0}} \frac{dF_A}{-r'_A}}$$

وهذه هي الصيغة التكاملية النهائية لمفاعل PBR الموجودة في الإطار بالصورة، والتي تشبه تماماً معادلة PFR لكن مع استبدال الحجم (V) بكتلة العامل المساعد (W).

Determination of Reactor volume – A plot of $\frac{F_{Ao}}{-r_A}$ vs. x

CSTR

$$V_{CSTR} = \left[\frac{F_{A0}}{-r_A}\right] \times [X_{CSTR}]$$



حكينا عنها سابقاً
مهمة جداً

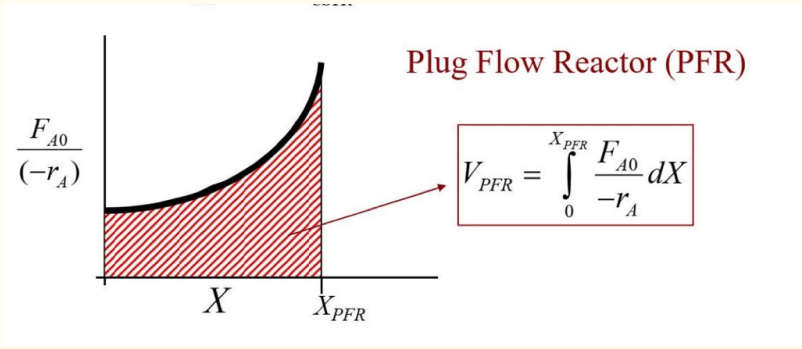
القيمة $\frac{F_{A0}}{-r_A}$ تُقاس
عند $X = X_{CSTR}$

حجم الـ CSTR يُمثّل هندسياً مساحة مستطيل

"المساحة فوق و تحت المنحنى"

PFR

$$V_{PFR} = \int_0^{X_{PFR}} \frac{F_{A0}}{-r_A}\, dX$$



يتم التكامل من بداية التفاعل X=0
وحتى نسبة التحويل المطلوبة

حجم الـ PFR يُمثّل هندسياً المساحة تحت المنحنى
Area under the curve



Stoichiometry in Liquid and Gas Systems

Topic 3

"These are the topics we will cover."

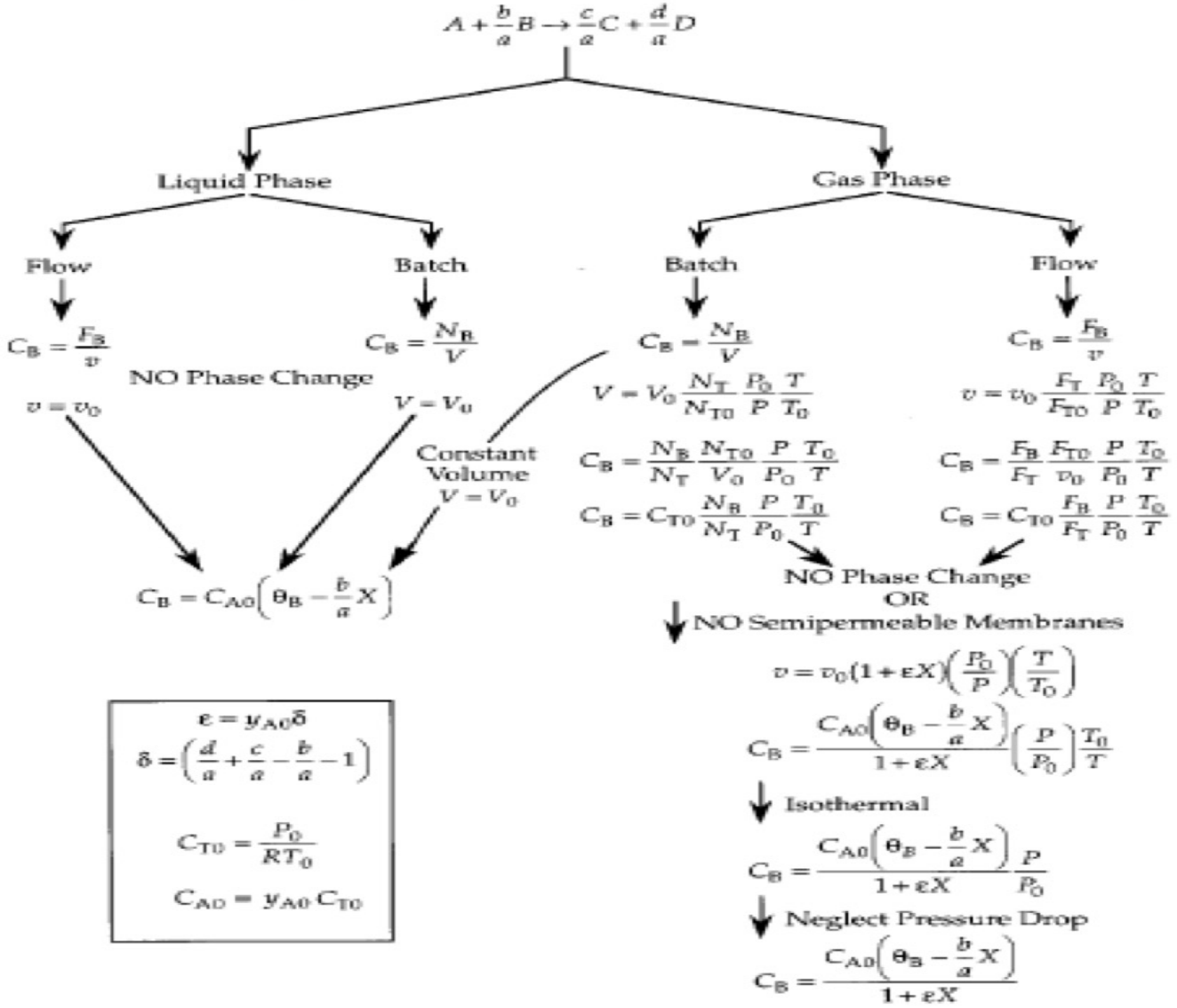
1. Stoichiometry and Conversion (X) and linking molar flow rates (Fi).

2. Liquid Systems and deriving concentrations at constant volume (vo).

3. Gas Systems and deriving volume change (v) as a function of pressure, temperature, and conversion.

4. Rate Law Applications (-rA) using the derived concentrations.

Summary



Concentration

بنعرف القانون العام للتركيز لأي مادة i:

$$C_i = \frac{F_i}{\upsilon}$$

$$A + \frac{b}{a}B \longrightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D$$

المادة المتفاعلة A: $F_A = F_{A0} - F_{A0}X = F_{A0}(1 - X)$

المادة المتفاعلة B: $F_B = F_{B0} - \frac{b}{a}F_{A0}X = F_{A0}\left(\frac{F_{B0}}{F_{A0}} - \frac{b}{a}X\right) = F_{A0}(\Theta_B - \frac{b}{a}X)$

المادة الناتجة C: $F_C = F_{C0} + \frac{c}{a}F_{A0}X = F_{A0}(\Theta_C + \frac{c}{a}X)$

المادة الناتجة D: $F_D = F_{D0} + \frac{d}{a}F_{A0}X = F_{A0}(\Theta_D + \frac{d}{a}X)$

Θ_i يمثل نسبة التدفق المولي الابتدائي للمادة i إلى المادة A:

$$\Theta_i = \frac{F_{i0}}{F_{A0}} = \frac{C_{i0}}{C_{A0}} = \frac{y_{i0}}{y_{A0}} \quad (\because \Theta_A = 1)$$

$\Theta_A = \frac{F_{A0}}{F_{A0}} = 1$ $\Theta_B = \frac{F_{B0}}{F_{A0}}$ $\Theta_C = \frac{F_{C0}}{F_{A0}}$ $\Theta_D = \frac{F_{D0}}{F_{A0}}$

δ يمثل صافي تغير عدد مولات النواتج إلى المتفاعلات لكل مول متفاعل من A:

Key.

$$\delta = \frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1$$

معدل التدفق المولي الكلي (F total):

$$F_T = F_A + F_B + F_C + F_D (+F_I \quad)$$

$$F_T = F_{T0} + \delta F_{A0}X$$

Liquid System

نعتبر السائل مائعاً غير قابل للانضغاط (Incompressible fluid).

$$v = v_0$$

$$C_A = \frac{F_A}{v_0} = C_{A0}(1 - X)$$

In liquid phase rate function on X only

$$C_B = \frac{F_B}{v_0} \qquad F_B = F_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right) \qquad C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0}$$

$$C_B = C_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right)$$

$$C_C = \frac{F_C}{v_0} = \frac{F_{A0}\left(\Theta_C + \frac{c}{a}X\right)}{v_0} \qquad C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0}$$

$$C_C = C_{A0}\left(\Theta_C + \frac{c}{a}X\right)$$

$$C_D = \frac{F_D}{v_0} = \frac{F_{A0}\left(\Theta_D + \frac{d}{a}X\right)}{v_0} \qquad C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0}$$

$$C_D = C_{A0}\left(\Theta_D + \frac{d}{a}X\right)$$

لكل المواد بالسوائل، القانون مرتبط ب CAo ومضروب بقوس X وΘ_i الفرق الوحيد هو الإشارة: سالبة للمتفاعلات وموجبة للنواتج

Gas system

في أنظمة الغازات (مثل التفاعلات التي تحدث في Tubular أو Packed bed reactors)، الحجم غير ثابت؛ لأن معدل التدفق الحجمي (v) يتغير بتغير المسافة من مدخل المفاعل بسبب تغير عدد المولات، الضغط، أو الحرارة.

البداية من قانون الغاز المثالي (Ideal Gas Law):

عندالدخول (Initial / Inlet)

$$P_0 v_0 = z_0 F_{T0} R T_0$$

عند أي نقطة داخل المفاعل (At any point)

$$P v = z F_T R T$$

$$\frac{P v}{P_0 v_0} = \frac{z F_T R T}{z_0 F_{T0} R T_0}$$

حيث z هو عامل الانضغاط compressibility factor، وغالباً بنعتبر السلوك مثالياً فبنعتبر z = zo = 1

ترتيب الحدود عشان اخليه لحاله معدل التدفق الحجمي (v):

$$\frac{v}{v_0} = \left(\frac{P_0}{P}\right)\left(\frac{F_T}{F_{T0}}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

$$v = v_0 \left(\frac{F_T}{F_{T0}}\right)\left(\frac{P_0}{P}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

بنعرف إن معدل التدفق المولي الكلي (F total) يعطى بالمعادلة:

$$F_T = F_{T0} + \delta F_{A0} X$$

لما نعوضها في قانون v فوق، بتصير المعادلة:

$$v = v_0 \left(\frac{F_{T0} + \delta F_{A0} X}{F_{T0}} \right) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)$$

$$1 + \frac{\delta F_{A0} X}{F_{T0}}$$

$$y_{A0} = \frac{F_{A0}}{F_{T0}}$$

$$\varepsilon = y_{A0} \delta$$

$$\Longrightarrow \mathrm{v} = \mathrm{v}_0 (1 + \varepsilon \mathrm{X}) \left(\frac{\mathrm{P}_0}{\mathrm{P}} \right) \left(\frac{\mathrm{T}}{\mathrm{T}_0} \right)$$

※ الشكل النهائي

تركيز المادة المتفاعلة A في الغازات (CA):

بناءً على القانون العام للتركيز $$C_A = \frac{F_A}{v}$$

بنعوض قيمة $$F_A = F_{A0}(1 - X)$$

وبنعوض قيمة v اللي طلعناها بدلالة X والضغط والحرارة.

فبيطلع معنا القانون النهائي لتركيز المادة A:

$$C_A = \frac{F_A}{v} = C_{A0}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

تركيز المادة المتفاعلة B في الغازات (CB)

$$C_B = \frac{F_B}{v}$$

$$F_B = F_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right)$$

$$v = v_0(1+\varepsilon X)\left(\frac{P_0}{P}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

$$C_B = \frac{F_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right)}{v_0(1+\varepsilon X)\left(\frac{P_0}{P}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)}$$

$$C_B = C_{A0}\left(\frac{\Theta_B - \frac{b}{a}X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

$$C_C = C_{A0}\left(\frac{\Theta_C + \frac{c}{a}X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

$$C_D = C_{A0}\left(\frac{\Theta_D + \frac{d}{a}X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

الفرق الوحيد بين المتفاعلات والنواتج هي الاشارة داخل
قوس البسط سالب للمتفاعلات وموجب للنواتج.

Example:

يعني على معادلات الـ gas

Calculate the equilibrium conversion (X_{ef}) for gas phase reaction in a flow reactor

Consider the following elementary reaction (isothermal, isobaric) $2A \Leftrightarrow B$ (reversible)

As K_c increase we are expecting irreversible.

Where K_C=20 dm^3/mol and C_{A0}=0.2 mol/dm^3.

K_C = Concentration of product / Concentration of Reactant

Calculate the equilibrium conversion for both a batch reactor (X_{eb}) and a flow reactor (X_{ef}).

Flow Reactor.

$2A \rightleftarrows B$

$A \rightleftarrows \frac{1}{2}B$

make A Key Component.

Gas isothermal $T = T_0$

Gas isobaric $P = P_0$

$$\Longrightarrow v = v_0(1+\varepsilon X)\left(\frac{P_0}{P}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

$$V = V_0(1+\varepsilon X)$$

$$C_A = \frac{F_A}{v} = C_{A0}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

$$C_A = C_{A0}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)$$

$$C_B = C_{A0}\left(\frac{\Theta_B + \frac{b}{a}X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

$$C_B = C_{A0}\left(\frac{\Theta_B + \frac{b}{a}X}{1+\varepsilon X}\right)$$

$$2A \rightleftharpoons B \qquad A \rightleftharpoons \frac{1}{2}B$$

$$C_A = \frac{C_{A0}(1-X)}{1+\epsilon X}$$

$$C_B = \frac{C_{A0}X}{2(1+\epsilon X)}$$

$$K_c = \frac{k_f}{k_b}$$

$$\frac{k_b}{k_f} = \frac{1}{K_c}$$

$$-r_A = k_f C_A^2 - k_B C_B$$

$$-r_A = k_f \left[C_A^2 - \frac{1}{K_c} C_B\right]$$

$$-r_A = k_f \left[C_A^2 - \frac{1}{K_c} C_B\right]$$

$$-r_A = k_f \left[\frac{C_{A0}^2(1-X)^2}{(1+\varepsilon X)^2} - \frac{1}{K_c}\frac{C_{A0}X}{2(1+\varepsilon X)}\right].$$

$$-r_A = k_f \left[\frac{C_{A0}^2(1-X)^2}{(1-\frac{1}{2}X)^2} - \frac{1}{K_c}\frac{C_{A0}X}{2(1-\frac{1}{2}X)}\right]$$

بما أن المادة A نقية
فإن $Y_{A0} = 1$

$$\delta = \left(\frac{1}{2}-1\right) = \frac{-1}{2}$$

$$\varepsilon = Y_{A0}\,\delta = 1\left(\frac{1}{2}-1\right) = \frac{-1}{2}$$

At equilibrium

$$-r_A = 0.$$

$$\frac{C_{A0}^2(1-X)^2}{(1-\frac{1}{2}X)^2} = \frac{1}{K_c}\frac{C_{A0}X}{2(1-\frac{1}{2}X)}$$

$$2K_c C_{A0} = \frac{X(1-\frac{1}{2}X)}{(1-X)^2}$$

$$2(20)(0.2) = \frac{X(1-\frac{1}{2}X)}{(1-X)^2}$$

$$8 = \frac{X - 0.5X^2}{(1-X)^2}.$$

$X = 0.757 \Leftarrow$ for flow

بس لما أتحكم بـ P و T بقدر أرفعها.

$$K_C = \frac{C_B}{C_A^2} = \frac{\frac{C_{A0}X}{2(1+\varepsilon X)}}{\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\right]^2} = \frac{C_{A0}X}{2(1+\varepsilon X)} * \frac{(1+\varepsilon X)^2}{C_{A0}^2(1-X)^2}$$

$$20 = \frac{(1-0.5X)\,X}{2(C_{A0}(1-X)^2}$$

$$20 = \frac{(1-0.5X)X}{2(0.2)(1-X)^2}$$

طريقة ثانية للحل

$$X = 0.757$$

batch Reactor

$$2A \rightleftharpoons B$$

$$\chi = \frac{\text{moles of A consumed}}{\text{initial moles of A}}$$

$$\text{moles of A Consumed} = N_{A_0}\chi$$

من الـ Stoichiometry كل 2mol A تعطينا 1mol B ، اذا كان عندي بالبداية B يعني $N_{B_0}=0$

اذاً

$$N_B = \frac{N_{A_0}\chi}{2}$$

نحولها من Concentration الى moles

$$C_B = \frac{N_B}{V} = \frac{N_{A_0}\chi}{2V} = \frac{C_{A_0}\chi}{2} = \frac{0.2\chi}{2} = 0.1\chi$$

$$C_A = \frac{N_A}{V} = \frac{N_{A_0}(1-\chi)}{V} = C_{A_0}(1-\chi) = 0.2(1-\chi)$$

$$K_C = \frac{C_B}{C_A^2}$$

* في الـ Batch الـ Volume يكون ثابت يعني هيك

عوضت V بنفسه ما هي

$$20 = \frac{0.1X}{[0.2(1-X)]^2}$$

$$X = 0.703 \leftarrow \text{for Batch}$$

$$2A \rightleftharpoons B \qquad A \rightleftharpoons \frac{1}{2}B$$

طريقة ثانية للحل

$$-r_A = K_f C_A^2 - K_B C_B$$

$$-r_A = K_f \left[C_A^2 - \frac{1}{K_C} C_B\right]$$

$$-r_A = K_f \left[C_A^2 - \frac{1}{K_C} C_B\right]$$

At equilibrium

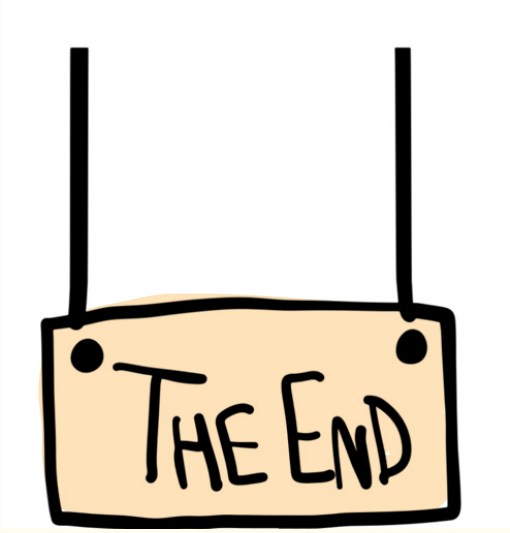
$$0 = [C_{A0}(1-X)]^2 - \frac{1}{20}\left(0.5 C_{A0} X\right)$$

$$[0.2(1-X)]^2 = \frac{1}{20}\left((0.5)(0.2)(X)\right)$$

$$X = 0.703$$

Note

في الـ flow المواد تدخل باستمرار
وتخرج باستمرار يعني ما بخلي B يتراكم داخل
المفاعل عشان هيك تأثير الـ product على الرجوع بكون أقل
و يتم استهلاك A بشكل أكبر وزي ما طلع معنا قيمة الـ X
للـ flow أكبر من الـ batch عشان الـ batch بيصير فيه
Accumulation .



Damkohler Number (Da)

$$Da = \frac{-r_A V}{F_{A0}} = \frac{\text{Reaction rate}}{\text{Diffusion rate}}$$

$$Da = K C_0^{n-1} \tau$$ ← القانون العام يعتمد على نوع ال order

K → Kinetics reaction rate constant

C_0 → initial Concentration

n → reaction order

τ → mean residance time or space time

↑ Da التفاعل سريع جداً مقارنة بالتوفق.

↓ Da التفاعل بطيء والتوفق سريع.

for first order

$n = 1$

$$Da = K C_0^{n-1} \tau$$

$$Da = K\tau$$

or $$Da = \frac{-r_A V}{F_{A0}} = \frac{K C_{A0} V}{C_{A0} v_0} = K\tau$$

if $Da < 0.1$

$\chi < 0.1$

ما عندهم القدرة
يتفاعلو

if

$Da > 10$

$\chi > 0.9$

الـ Reaction Rate عالي

Example

The formation of ammonia is to be carried out isothermally at 227°C in packed bed reactor and with a pressure of 16.4 atm. This is an isobaric (constant pressure) flow system with equimolar feeds of N_2 & H_2. Assume the gas mixture behaves like an ideal gas.

$$H_2 + \tfrac{1}{3}N_2 \rightarrow \tfrac{2}{3}NH_3$$

irreversible

$$A + \frac{1}{3}B \rightarrow \frac{2}{3}C$$

أوجد C_{NH_3} ، C_{N_2} ، C_{H_2} لتفاعل يستهلك 60% من H_2

بما أن gas ← يروح على معادلة تقم

$$C_A = \frac{F_A}{v} = C_{A0}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

$\delta = \frac{2}{3} - \frac{1}{3} - 1 = \frac{-2}{3}$

$\varepsilon = Y_{A0}\,\delta$

$\varepsilon = (0.5)\left(\frac{-2}{3}\right)$

$= \frac{-1}{3}$

حالياً السؤال
isobaric, isothermal
وكمان
equimolar
يعني $Y_A = Y_B = 0.5$

$$C_A = C_{A0}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)$$

$C_{A0} = \frac{F_{A0}}{V}$

ومعنى
V و F

فنقدر نحل على حاظ القانون

بس هو معطيني
T و P
و مفترض
Ideal Gas

$$PV = nRT$$

في حال ربط C بـ T, P

$$\frac{P}{RT} = \frac{N_{total}}{V}$$

N_2 & H_2 are equimolar in feed $\quad N_{A0} = \frac{1}{2} N_{T0}$

$$C_{A0} = \frac{N_{A0}}{V} = \frac{0.5\, N_{total}}{V} = \frac{0.5\, P}{RT} = \frac{(0.5)\,(16.4\ atm)}{\left(0.082 \frac{atm \cdot L}{mol \cdot K}\right)(500 K)}$$

كمان وحدة P ← atm

$$C_{A0} = 0.2 \frac{mol}{L}$$

When $X = 0.6$

$$C_A = C_{A0}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)$$

$$0.2\left(\frac{1-0.6}{\left(1-\frac{1}{3}(0.6)\right)}\right)$$

$$= 0.1 \frac{mol}{L}$$

$$C_B = C_{A0}\left(\frac{\Theta_b - \frac{b}{a}X}{1+\varepsilon X}\right)$$

$$= \frac{0.2\left(1-\frac{1}{3}(0.6)\right)}{\left(1-\frac{1}{3}(0.6)\right)}$$

$$= 0.2 \frac{mol}{L}$$

$$C_C = C_{A0}\left(\frac{\Theta_c + \frac{c}{a}X}{1+\varepsilon X}\right) = \frac{0.2\left(\frac{2}{3}\right)(0.6)}{\left(1-\frac{1}{3}(0.6)\right)} = 0.1 \frac{mol}{L}$$

Example

n = 2

PFR نفس

Consider the following second order reaction takes place in a tubular reactor at isothermal condition. What will be the volume of this reactor if (a) is a liquid phase (b) gas phase reaction is considered.

$$2A \rightarrow B$$

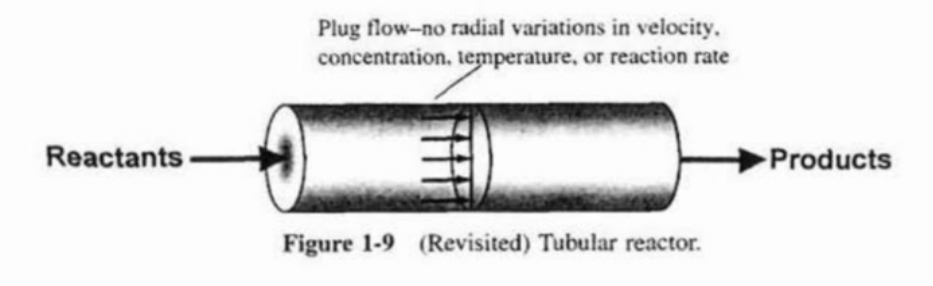


Figure 1-9 (Revisited) Tubular reactor.

@ liquid phase

$V = V_0$

$2A \rightarrow B$

irreversible

أول خطوة بروح على topic (1) بجيب منه معادلة الـ Volume لـ PFR ←

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dx}{-r_A}$$

بدي أكتب معادلة الـ Rate ←

$$-r_A = K C_A^2$$

بدي أكتب الـ Concentration في حالة الـ liquid phase ←

$$C_A = C_{A0}(1-X)$$

$$V = F_{A0} \int \frac{1}{K(C_{A0}(1-X))^2} dx$$

$$V = \frac{F_{A0}}{K C_{A0}^2} \int_0^x \frac{1}{(1-X)^2}\, dx$$

$$V = \frac{C_{A0} V_0}{K C_{A0}^2} \int_0^x \frac{1}{(1-X)^2}\, dx$$

$$V = \frac{V_0}{K C_{A0}} \int_0^x \frac{1}{(1-X)^2}\, dx$$

$$\int_0^x \frac{1}{(1-X)^2}\, dx = \int (1-X)^{-2}\, dx$$

$$\frac{(1-X)^{-1}}{-1 * -1} = \left(\frac{1}{1-X}\right)\Bigg]_0^x$$

$$= \frac{1}{1-X} - 1$$

$$= \frac{X}{1-X}$$

$$V = \frac{V_0}{K C_{A0}} \quad \frac{X}{1-X}$$

$$K C_{A0} \tau = \frac{X}{1-X}$$

Da_2

$$\frac{V}{V_0} = \tau$$

$$Da_2(1-X) = X$$

$$Da_2 - Da_2 X = X$$

$$Da_2 = X + Da_2 X$$

$$\frac{Da_2}{1+Da_2} = X$$

(b) Gas phase $\quad 2A \rightarrow B$ Isothermal *

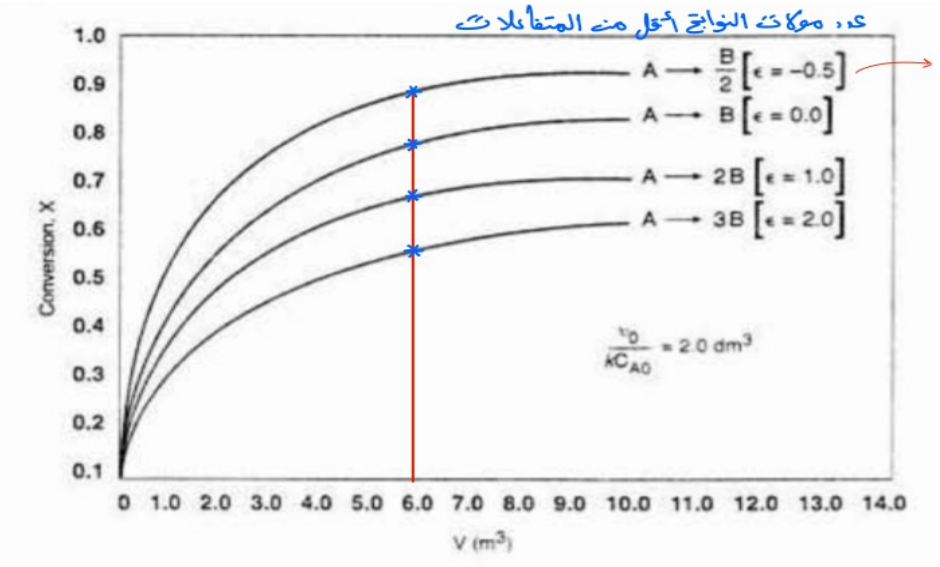
Isobaric *

$$V = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{-r_A}$$

$$-r_A = KC_A^2$$

$$C_A = \frac{F_A}{V} = \frac{F_{A0}(1-X)}{V_0(1+\varepsilon X)} = \frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}$$

$$V = F_{A0}\int \frac{1}{K\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\right]^2} = \frac{F_{A0}}{KC_{A0}^2}\int_0^X \frac{1}{\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)^2} dX$$



نسبة تحويل أكبر عند حجم أقل.

ε<0 نسبة تحويل عالية بحجم مفاعل أصغر

ε>0 تتطلب حجم مفاعل كبير للوصول الى نفس نسبة التحويل

Conversion as a function of distance down the reactor.

Calculation of equilibrium Conversion

Example

The reversible gas-phase decomposition of nitrogen tetroxide N_2O_4, to nitrogen dioxide NO_2 is to be carried out isothermally at 340 K and pressure of 202.6 kPa (2 atm) [This pressure is for inlet feed]. The conc. equil. const. $K_c = 0.1$ mol/L

pure $y_{A0} = 1$

$$N_2O_4 \rightleftharpoons 2\,NO_2$$

a) Calc. the equil. conversion of N_2O_4 in a const. vol. batch Rxr

مطلوب قيمة X

أهم معلومة "تعاملك كانه liquid" in batch Rxr

$$A \rightleftharpoons 2B$$

$$N_A = N_{A0}(1 - X)$$

$$N_B = N_{A0}(\Theta_B + 2X)$$

$$N_T = N_{T0} + N_{A0}X$$

$$C = \frac{F}{V}$$

also $C_A = C_{A0}(1 - X)$, $C_B = 2C_{A0}X$

and

معطيني T و P

$$C_{A0} = \frac{y_{A0}P_0}{RT_0} = \frac{(1)(202.6\ \text{kPa})}{\left(8.314\ \frac{\text{kPa·L}}{\text{mol·K}}\right)(340\ \text{K})} = 0.071\ \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$K_c = \frac{C_{B,eq}^2}{C_{A,eq}} = \frac{(2C_{A0}X_{eq})^2}{C_{A0}(1 - X_{eq})} = \frac{4C_{A0}X_e^2}{1 - X_{eq}} = 0.1$$

$$X_{eq} = 0.44$$

b) Calculate the equil. conv. of N_2O_4 in a flow reactor

In a flow reactor $v = v_0(1+\epsilon X)$

and

$$C_A = \frac{F_A}{v} = \frac{F_{A0}(1-X)}{v} = \frac{F_{A0}(1-X)}{v_0(1+\epsilon X)}$$

$$= C_{A0}\frac{(1-X)}{(1+\epsilon X)}$$

Similarly $C_B = \frac{2C_{A0}X}{1+\epsilon X}$ ← في flow كمان بلغيها

$$\therefore K_c = \frac{C_{Beq}^2}{C_{Aeq}} = \frac{[2C_{A0}X_{eq}/(1+\epsilon X_{eq})]^2}{C_{A0}(1-X_{eq})/(1+\epsilon X_{eq})} = \frac{4C_{A0}^2 X_{eq}^2}{(1-X_{eq})(1+\epsilon X_{eq})} = 0.1$$

For $\epsilon = y_{A0}\delta = (1)[2-1] = 1 \Rightarrow X_{eq} = 0.51$

نلاحظ انه الرقم هون اكبر من الـ batch Rxn بسبب انه بيسمح الـ flow بتمدد الحجم.

$$v = v_0(1+\varepsilon X)\left(\frac{P_0}{P}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

$$V = V_0(1+\varepsilon X)$$

$$C_B = C_{A0}\left(\frac{\Theta_B + \frac{b}{a}X}{1+\varepsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

$$C_B = C_{A0}\left(\frac{0+2X}{1+\varepsilon X}\right)$$

c) what will be the rate for this Rxn in a batch and flow Rxr?

$$+r_A = -k_{Af} C_A + k_{Ab} C_B^2 \qquad A \underset{k_{Ab}}{\overset{k_{Af}}{\rightleftharpoons}} 2B$$

$$\therefore -r_A = k_{Af}\left[C_A - \frac{C_B^2}{K_c}\right]$$

For batch : $$-r_A = k_{Af}\left[C_{A_0}(1-x) - \frac{4C_{A_0}^2 x^2}{K_c}\right]$$

For flow : $$-r_A = k_{Af}\left[\frac{C_{A_0}(1-x)}{(1+\epsilon x)} - \frac{4C_{A_0}^2 x^2}{K_c(1+\epsilon x)^2}\right]$$

d) Determine the CSTR volume necessary to achieve 80% of the equil. conversion if $F_A = 3$ mol/min, $k_{Af} = 0.5$ /min

X = 80% of X_{eq}

$$\therefore X = 0.8\,(0.5) = 0.4$$

$$-r_A = k_{Af}\left[\frac{C_{A_0}(1-x)}{(1+\epsilon x)} - \frac{4C_{A_0}^2 x^2}{K_c(1+\epsilon x)^2}\right]$$

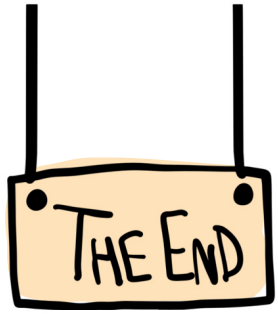
$$= 0.5\left[0.072\frac{(1-x)}{(1+x)} - \frac{4(0.072)^2 x^2}{0.1(1+x)^2}\right]$$

$$= 0.0036\left[\frac{(1-x)}{(1+x)} - \frac{2.88x^2}{(1+x)}\right] \quad \frac{\text{mol}}{\text{L·min}}$$

$$V = \frac{F_{A_0} X}{-r_A|_X} = \frac{(3\ \text{mol/min})(0.4)}{-r_A|_{x=0.4}}$$

@ $x = 0.4 \Rightarrow -r_A = 0.0007 \ \frac{\text{mol}}{\text{L·min}}$

$$\therefore V = \frac{3 \times 0.4}{0.0007} = 1714\ \text{L} = 1.71$$



Collection and analysis of rate data

Topic 5

We will study 4 methods to determination rate order

① method of excess (initial rate method)

② method of half-lives

③ Integral method

④ Differential method

الهدف انه أنا أحسب
رتبة التفاعل
قيمة n

* method of excess

$$\alpha A + \beta B \longrightarrow \text{product}$$

التفاعل يعتمد على A, B
فقانون حركة التفاعل يعتمد
على تراكيزهما

$$-r_A = K C_A^{\alpha} C_B^{\beta}$$

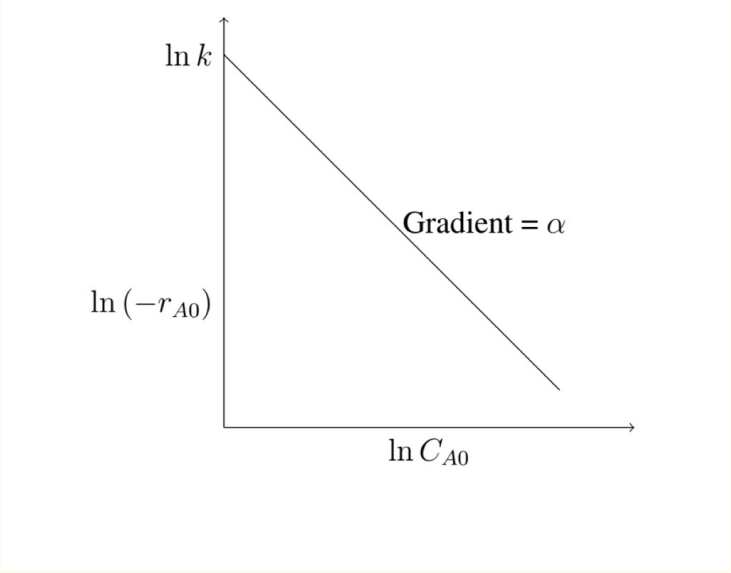
ليه بقدرت أحسب رتبة
التفاعل في نفس الوقت
كأن هيلاء بدخل
مادة منهم بكمية زيادة
Excess

بفرض المادة B في كمية كبيرة جدًا مقارنة بـ A
فتركيزها تقريباً لا يتغير أثناء التفاعل $C_B \approx C_{B0}$
C_B بعتبره ثابت فبرمجه مع ثابت السرعة K
فبيصير عندي ثابت جديد K'
بيصير القانون معتمد على تركيز المادة A فقط

$$-r_A = K' C_A^{\alpha}$$

$$\ln(-r_{A0}) = \ln(k') + \alpha \ln(C_{A0})$$

فبوجد قيمة الـ α

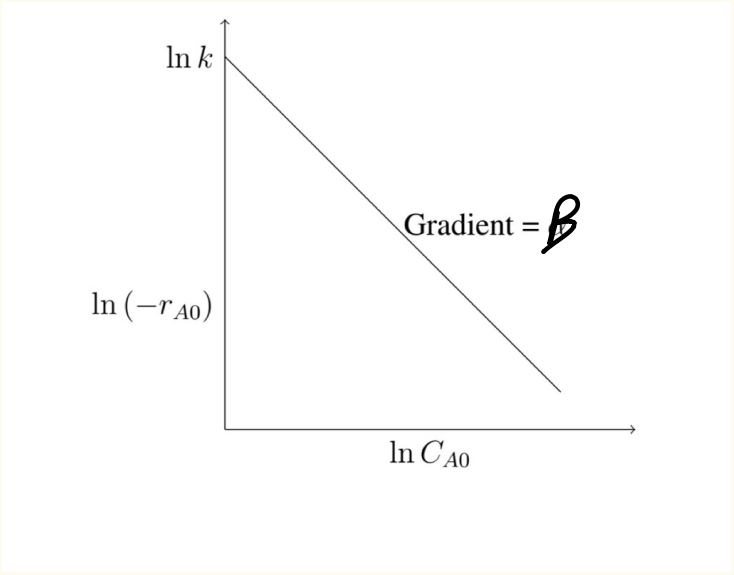


وهسا بدخل تركيز A بشكل فائض

$C_A \approx C_{A0}$

$$-r_A = K'' C_B^{\beta}$$

$$\ln r_A = \ln K'' + \beta \ln C_B$$



Example

Given the following data for variation of concentration of species with the rate of their reaction. Determine the order of reaction using the initial rate method.

هي نفسها method of excess.

A+ B+ 2C → D + 2E

$-r_A = K C_A^a C_B^b C_C^c$

$n = a+b+c$

1+2+0 ✓

$n = 3$

third order ※

$K = \frac{[\text{concentration}]^3}{[\text{time}]}$

Experiment	[A] mol dm^{-3}	[B] mol dm^{-3}	[C] mol dm^{-3}	Rate mol dm^{-3} s^{-1}
1	0.1	0.5	0.25	0.1
2	0.2	0.5	0.25	0.2
3	0.1	1.0	0.25	0.4
4	0.1	0.5	0.5	0.1

الهدف أثبت تركيز مادتين وأخوف نأخي المادة الثالثة على سرعة التفاعل.

بتجربة (1) و (2) B و C ثابتين، A تضاعفت تركيزها و Rate تضاعف يعني $\alpha = 1$

$$2^{\alpha} = 2$$

بتجربة (1) و (3) C, A ثابتين، B تضاعفت تركيزها و Rate تضاعف أربع مرات

$$2^{\beta} = 4 \qquad \beta = 2$$

بتجربة (1) و (4) B, A ثابتين، C تضاعف تركيزها و Rate بقى كما هو لم يتغير

$$2^{\gamma} = 1 \qquad \gamma = 0$$

$$r = K C_A C_B^2$$

The reaction is third order

من topic2 وحدة K $\left[\frac{L^2}{mol^2 \cdot S}\right]$

* Method of half-lives

ببساطة هي طريقة نصف الحياة يعني بدي أحسب قيمة زمن نصف العمر $t_{\frac{1}{2}}$ لحتى $C_A = \frac{1}{2} C_{A0}$

$$t_{1/2} = \frac{2^{\alpha-1} - 1}{k(\alpha - 1) C_{A0}^{\alpha-1}}$$

بيحلو أزعم سؤال



لما $\alpha = 2$ تكون $t_{\frac{1}{2}}$ ∝ $\frac{1}{C}$

لما $\alpha = 1$ تكون $t_{\frac{1}{2}}$ ثابتة

لما $\alpha = 0$ تكون العلاقة بينهم طردية

Example

Based on the following concentration data as a function of time, determine the behavior of the half-life as the reaction progresses. Use this information to determine if the following reaction is 0 order, 1 order, or 2 order in A. Also, use the data to estimate the rate constant for the reaction.

time (s)	[A] (M)
0	1.200
10	0.800
20	0.600
30	0.480
40	0.400
50	0.343
60	0.300
70	0.267
80	0.240
90	0.218
100	0.200

1.2 → 0.6
20S
0.8 → 0.4
30S
0.6 → 0.3
40S
0.48 → 0.24
50S
0.4 → 0.2
60S

ln CA°
ln $t_{\frac{1}{2}}$

بدنا نشوف قيمة α هل هي 1, 2, 3 ؟؟

$\alpha = 2$ علاقة الـ Concentration مع time عكسية ف

$$t_{1/2} = \frac{2^{\alpha-1} - 1}{k(\alpha - 1)C_{A0}^{\alpha-1}}$$

بدي أخذ:
$1.2 \rightarrow 0.6$
$t = 20S$

$$20 = \frac{(2)^{2-1} - 1}{K(2-1)(1.2)^{2-1}}$$

$$K = 0.0417 \frac{L}{mol \cdot S}$$

※ Integral method ※

هاي الطريقة تعتمد على trial and error لتحديد رتبة التفاعل

الخطوات

① نفرض رتبة للتفاعل قيمة د α.

معادلة الرتبة الصفرية $\alpha=0$

$$-\frac{dC_A}{dt} = -r_A = kC_A^{\alpha}$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = -r_A = k$$

$$\int_{C_{A0}}^{C_A} dC_A = \int_0^t -k\,dt$$

$$C_A - C_{A0} = -kt$$

$$C_A = -kt + C_{A0}$$

$\alpha = 1$ first order reaction

$$-\frac{dC_A}{dt} = KC_A$$

$$-\frac{dC_A}{C_A} = K\,dt$$

$$\ln \frac{C_{A_0}}{C_A} = Kt$$

$\alpha = 2$ Second order reaction

$$-\frac{dC_A}{dt} = KC_A^2$$

$$-\frac{dC_A}{C_A^2} = K\,dt$$

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A_0}} = Kt$$

الرتبة الصحيحة للتفاعل هي التي تعطي خطاً مستقيماً (Straight Line) يمر بالنقاط بشكل كثير دقيق إذا ما اعطانيش خط مستقيم، بنجرب رتبة ثانية.

※ Differential method ※

← بحدد رتبة التفاعل بدون ما أفرض شيء مش زي الـ Integral

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_A C_A^{\alpha}$$

بأخذ الـ ln للطرفين

$$\ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right) = \ln k_A + \alpha \ln C_A$$

عشان صعب أوجد $\frac{dC_A}{dt}$ عملياً بحولها الى

$$\ln\left(-\frac{\Delta C_A}{\Delta t}\right) = \ln k_A + \alpha \ln C_A$$

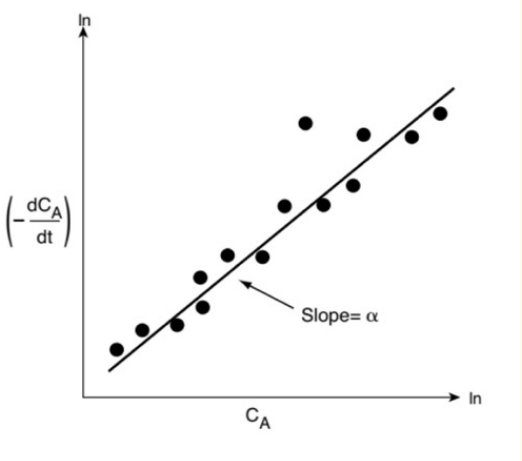
محور (y): $\ln\left(-\frac{\Delta C_A}{\Delta t}\right)$

محور (x): $\ln C_A$

ميل الخط المستقيم (Slope) الناتج من الرسم يمثل مباشرة رتبة التفاعل α

إيجاد ثابت السرعة (kA): نقطة التقاطع مع المحور الصادي (Intercept)

ومن خلالها بقدر احسب قيمة ثابت السرعة kA.



Example

Liquid phase reaction between trimethylamine(A) and n-propyl bromide (B) was studied by Winkler & Hinshelwood. The results at 139.4 C are shown below. Initial solutions of A and B in benzene is 0.1 molar each, were mixed and placed in constant temperature bath. After certain times, they were cooled to stop the reaction. Determine the first order and second order specific rates, k1 and k2, assuming the reaction is irreversible. Use integration and differential methods.

Run	t, min	x (%)
1	13	11.2
2	34	25.7
3	59	36.7
4	120	55.2

$C_A = 0.1 \times (1 - \frac{11.2}{100}) = 0.0888$ M

$C_A = 0.1 \times (1 - \frac{25.7}{100}) = 0.0743$ M

$C_A = 0.1 \times (1 - \frac{36.7}{100}) = 0.0633$ M

$C_A = 0.1 \times (1 - \frac{55.2}{100}) = 0.0448$ M

$A + B \rightarrow C + D$

Liquid phase rxn

يعني ال Volume Constant

$C_{A_o} = 0.1$

** Integration

"طريقة الفرق"

first order $\alpha = 1$ بدي أبلش بفرق

باخذ المعادلة جاهزة

$$\ln \frac{C_{A_o}}{C_A} = Kt$$

for first run

$C_A = C_{A_o}(1 - \chi)$

$\chi = 11.2\%$

$t = 13$ min

$C_A = 0.1(1 - 0.112)$

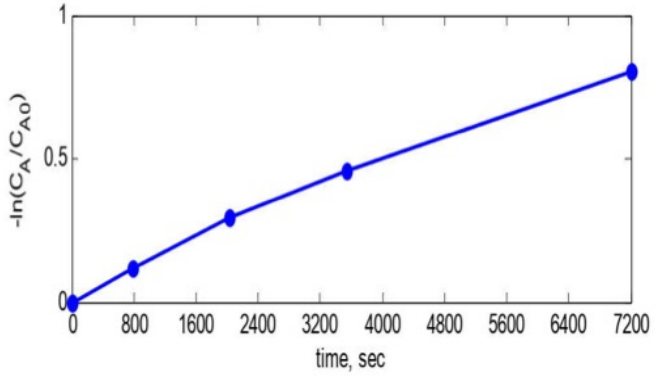
$C_A = 0.0888$

$$K_1 = \ln\left(\frac{C_{A0}}{C_A}\right)\frac{1}{t}$$

$$\ln\left(\frac{0.1}{0.0888}\right)\frac{1}{13*60} = 1.523*10^{-4}\ S^{-1}$$

If you repeat for four of the runs:

Run	t, sec	$k_1 \times 10^{-4}$ (s^{-1})
1	780	1.54
2	2040	1.46
3	3540	1.30
4	7200	1.12



four runs لـ K كلما كانت قيم متقاربة بشكل كبير

يكون هي رتبة التفاعل.

هون لما كانت α=1 مش كتير متقاربة ف التفاعل مش first order

Second order $\alpha = 2$

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = Kt$$

$\chi = 11.2\%$

$t = 13\ min$

$$C_A = C_{A0}(1-\chi)$$

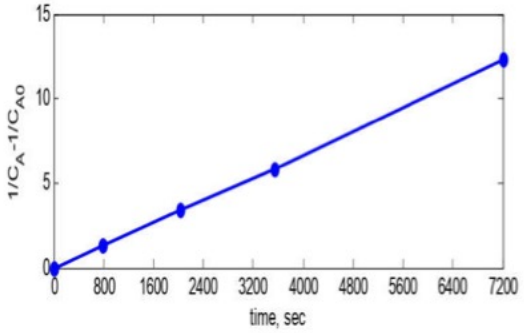
$$C_A = 0.1(1-0.112)$$

$$C_A = 0.0888$$

$$K = \left(\frac{1}{0.0888} - \frac{1}{0.1}\right) * \frac{1}{13*60} = 1.62*10^{-3}\ \frac{L}{mol.S}$$

If you repeat for four of the runs:

Run	t, sec	$k_1 \times 10^{-4}$ (s^{-1})	$k_2 \times 10^{-3}$ (L/mol s)
1	780	1.54	1.63
2	2040	1.46	1.70
3	3540	1.30	1.64
4	7200	1.12	1.71



So, it is SECOND ORDER

قيم K متقاربة بشكل كبير أكثر من لما كانت $\alpha = 1$

باختصار: الهدف مش أنك تبحث عن رتبة "أعلى"،الهدف تدور عن الرتبة التي بيكون فيها تطابق وتعطيك خطاً مستقيم افضل ، وغالباً مش رح تطلع عن نطاق الصفر، الأولى، أو الثانية.

※ Differentiation

لما يكون معطيني جدول (t) مع (X) أو التركيز (C_A)

ومعطيني C_{A0}

بحسب C_A اذا كانه في liquid phase بتكون $C_A = C_{A0}(1-X)$

وباخذ C_A لـ ln

بحسب $\left(-\frac{\Delta C_A}{\Delta t}\right) = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{t_2 - t_1}$ وباخذ $\left(-\frac{\Delta C_A}{\Delta t}\right)$ لـ ln

بحسب الـ Slope بايجاد α

$$\alpha = \frac{\ln(r_2) - \ln(r_1)}{\ln(C_{A2}) - \ln(C_{A1})}$$

$$\ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right) = \ln k_A + \alpha \ln C_A$$

بين Run 2 و Run 1

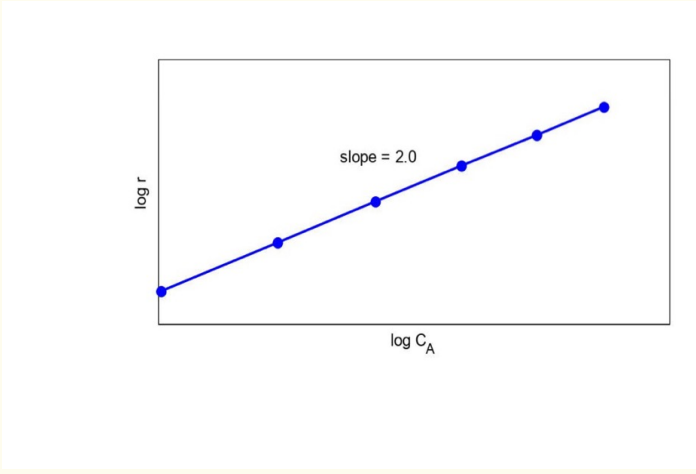
$$-\frac{\Delta C_A}{\Delta t} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{t_2 - t_1} = \frac{0.0888 - 0.0743}{34 - 13} = 6.9 * 10^{-4}$$

$$C_A = \frac{C_{A1} + C_{A2}}{2} = \frac{0.0888 + 0.0743}{2} = 0.08155$$

بين Run 4 و Run 3

$$-\frac{\Delta C_A}{\Delta t} = \frac{0.0185}{61} = 3.03 * 10^{-4}$$

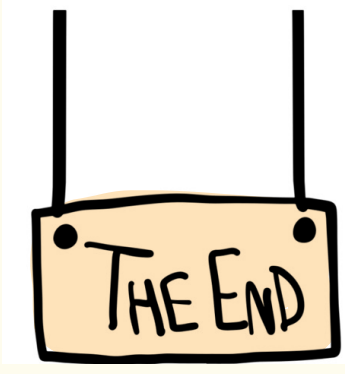
$$C_A = 0.05405$$



$$\alpha = \frac{\ln(r_2) - \ln(r_1)}{\ln(C_{A2}) - \ln(C_{A1})}$$

$$\alpha = \frac{\ln(3.03 * 10^{-4}) - \ln(6.9 * 10^{-4})}{\ln(0.05405) - \ln(0.08155)}$$

$$\alpha = 2 \ \#\#$$



Comparison between Reactors

Topic 6

"These are the topics we will cover."

1. Graphical interpretation of reactor sizing

رح نستخدم منحنى اسمه Levenspiel Plot لنحسب حجوم المفاعلات

2. Space-time and space-velocity

3. Reactors in series

4. Combinations of CSTRs and PFRs in series

5.Comparing CSTR & PFR sizing

مقارنة بين مفاعلات PFR و CSTR

مفاعل الخزان المقلب باستمرار (CSTR)

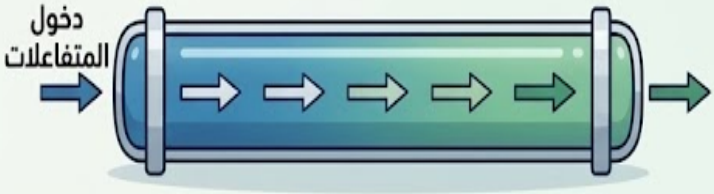


أهم ميزتين

1. **خلط تام وفوري:**
تتجانس المواد فور دخولها ويتم توزيعها بالتساوي في جميع المفاعل.

2. **تجانس الظروف التشغيلية.**
التركيز ودرجة الحرارة متطابقان داخل المفاعل وعند المخرج.

مفاعل التدفق السدادي (PFR)



أهم ميزتين

1. **انعدام الخلط الطولي (Axial Mixing).**
تتحرك المواد كشريحة واحدة (سدادة) دون اختلاط في اتجاه التدفق.

2. **تدرج التركيز والظروف.**
تتغير التراكيز ودرجة الحرارة تدريجياً على طول المفاعل.

الفروقات الرئيسية الشاملة

- **نمط الجريان :** PFR يتميز بتدفق سدادي متدرج؛ CSTR يتميز بخلط تام ومستمر.
- **كفاءة الحجم والتحول :** مفاعل PFR يتطلب **حجمًا أصغر بكثير** لتحقيق نفس نسبة التحول مقارنة بمفاعل CSTR.

✳ Batch Reactor

من topic 2

بدي أجيب معادلة الـ design

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$$

$$\frac{d[N_{A0}(1-X_A)]}{rV} = dt$$

$$t = N_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A V}$$

الـ batch أفضل من CSTR لو ثبتت الـ time

الـ performance لـ batch أفضل بس الـ yield لـ CSTR أفضل

✳ Space time and space velocity ✳

Space time [time] وحدتها

$$\tau = \frac{V}{V_0} = \frac{\text{reactor volume}}{\text{volumetric feed rate}}$$

هو الوقت اللازم حتى يمر المائع (fluid) حتى يمر داخل الـ reactor ويطلع منه

أنا بحب تكون قيمة X الـ Conversion عالية يعني τ عالية يعني الـ reactants تطول أكثر داخل الـ reactor

※ Space Velocity ※

هو عبارة عن مقلوب الـ Space time

$$S = \frac{1}{\tau} \quad [time]^{-1}$$ وحدتها

أنا بدي S لـ τ يعني τ لـ X.

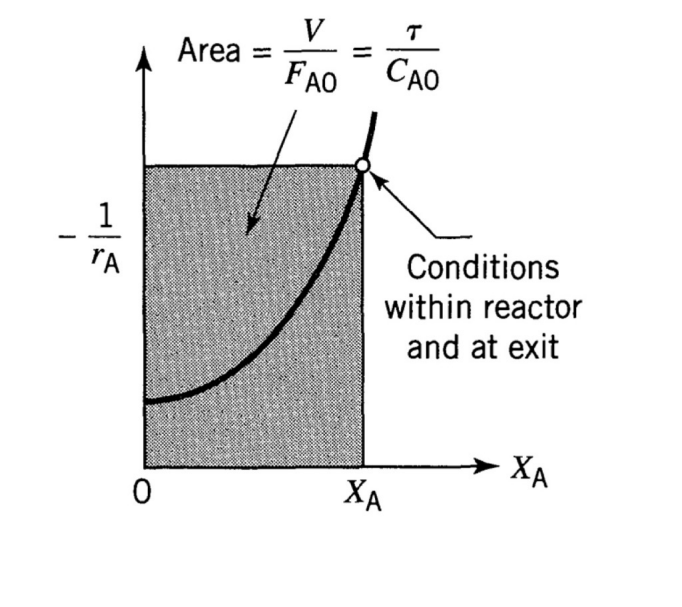
※ Continous Stirred Tank Reactor [CSTR]

$$\frac{F_{A0} X}{-r_A} = V$$

$$\frac{V}{V_0} = \tau$$

$$\frac{C_{A0} V_0 X}{-r_A} = V$$

$$\frac{C_{A0} X}{-r_A} = \tau$$



مفهم جوًا أخر Conversion في CSTR هو اللي بيحدد الـ Size كازم على أخر وحدة

※ plug flow Reactor [PFR]

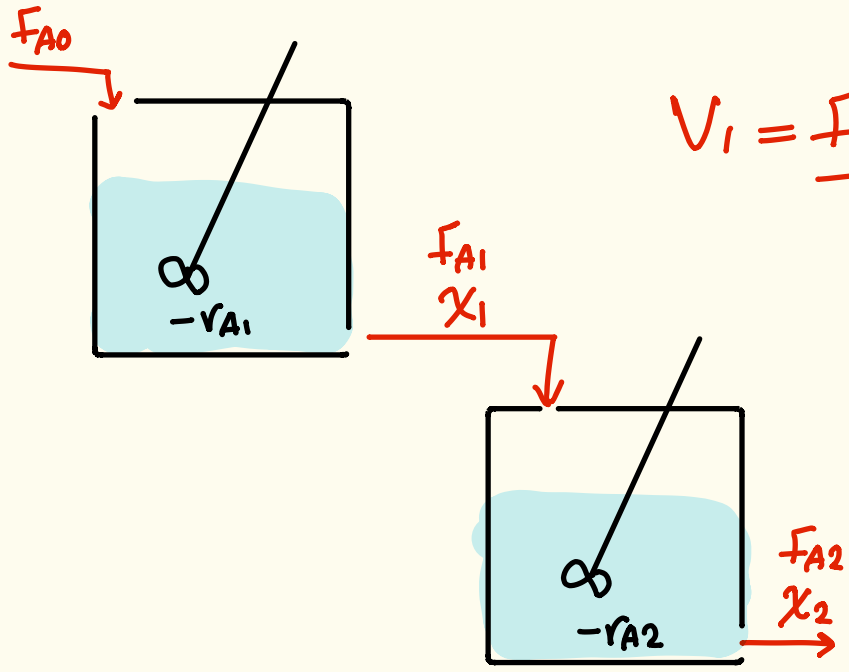
$$V = F_{A0} \int \frac{dx}{-r_A}$$

جبت معادلة ال design

$$\tau = C_{A0} \int_0^x \frac{dx}{-r_A}$$

※ Reactors in Series ※

① CSTR in Series



$$V_1 = \frac{F_{A0} X_1}{-r_A}$$

$$V_2 = \frac{F_{A0}}{-r_{A2}} (X_2 - X_1)$$

F_{A0} ← معدل التدفق المولي الإبتدائي عند دخول المفاعل الأول

X_1 ← نسبة التحول الناتجة من المفاعل الأول

X_2 ← نسبة التحول بعد الخروج من المفاعل الثاني.

Example 6.1 CSTRs in series

For the two CSTRs in series, 40% conversion is achieved in the first reactor. What is the volume of each of the two reactors necessary to achieve 80% overall conversion of the entering species A?

X	0.0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.7	0.8
$(F_{A0}/-r_A)(m^3)$	0.89	1.09	1.33	2.05	3.54	5.06	8.0

Solution

$$X_1 = 0.4$$

$$V_1 = \frac{F_{A0} X_1}{-r_{A1}} = (2.05)(0.4) = 0.82\ m^3.$$

$$X_2 = 0.8$$

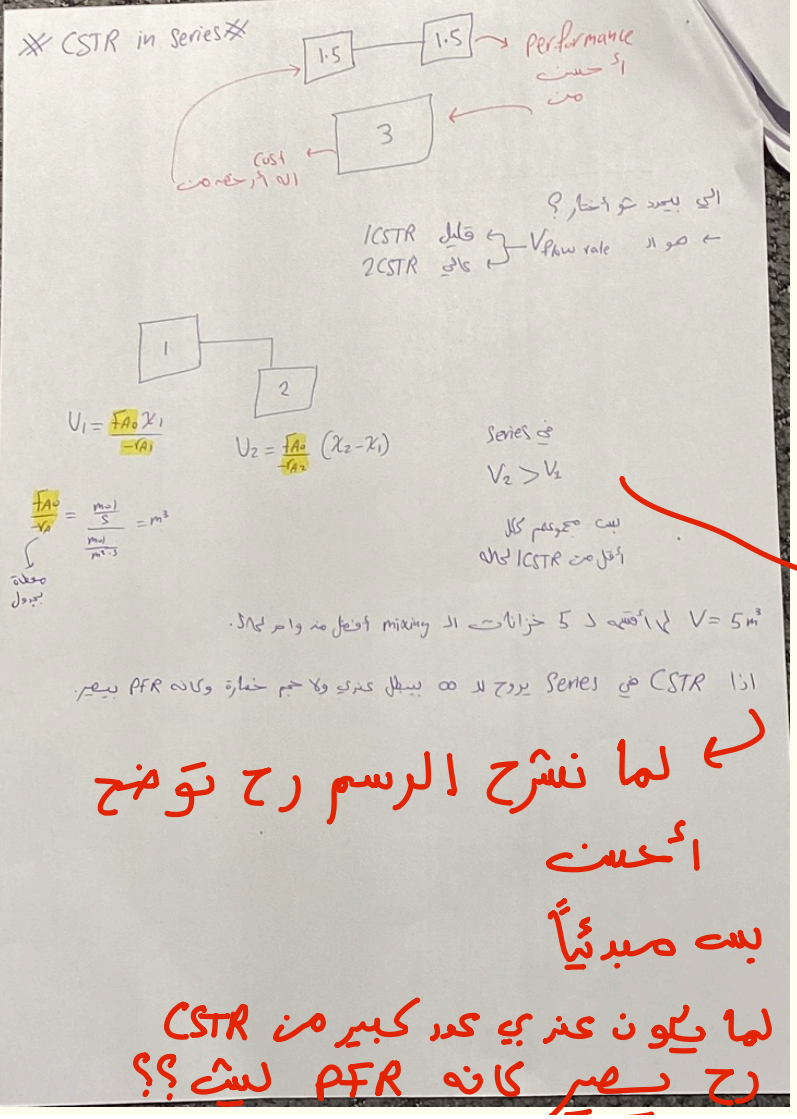
$$V_2 = \frac{F_{A0}}{-r_{A2}} (X_2 - X_1) = 8(0.8 - 0.4) = 3.2\ m^3$$

$$V = V_1 + V_2 = 4.02\ m^3$$

لو بدي نفس قيمة X بس لواحد CSTR

$$V = \left(\frac{F_{A0}}{-r_A}\right) X$$

$$= (8)(0.8) = 6.4\ m^3$$



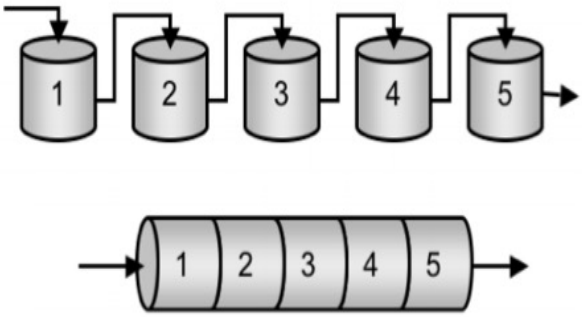
اثنين CSTR صغار
أداء تجمعهم أفضل من
واحد كبير بس الكبير أرخص
من الإثنين الصغار.

من المثال

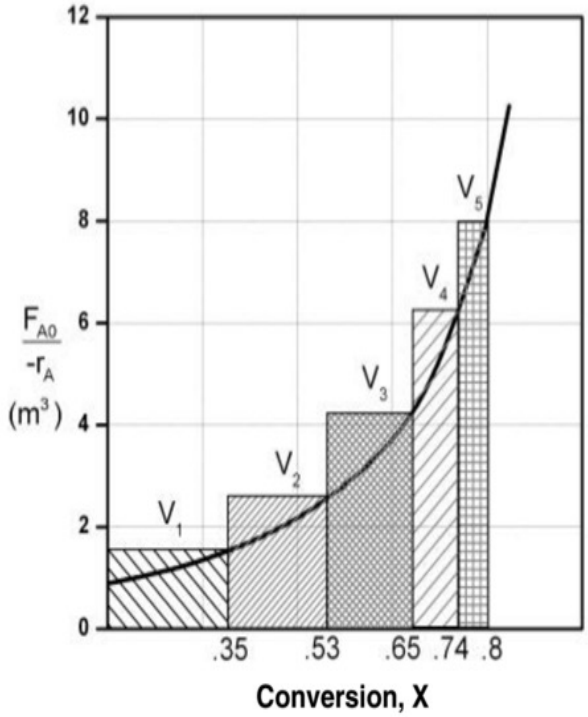
$V_2 > V_1$

$3.2 > 0.82$

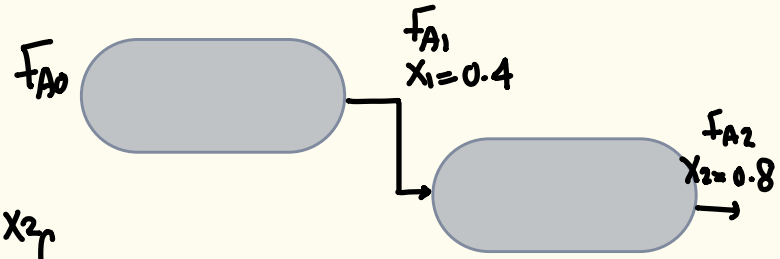
Approximating a PFR by a Large Number of CSTRs in Series



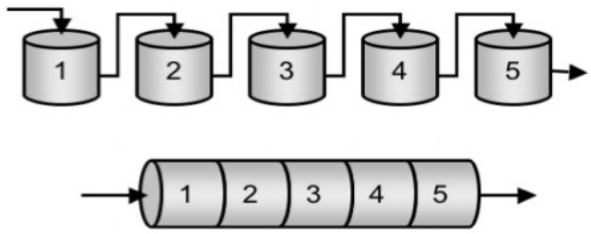
A one PFR can be modeled by a large number of CSTRs



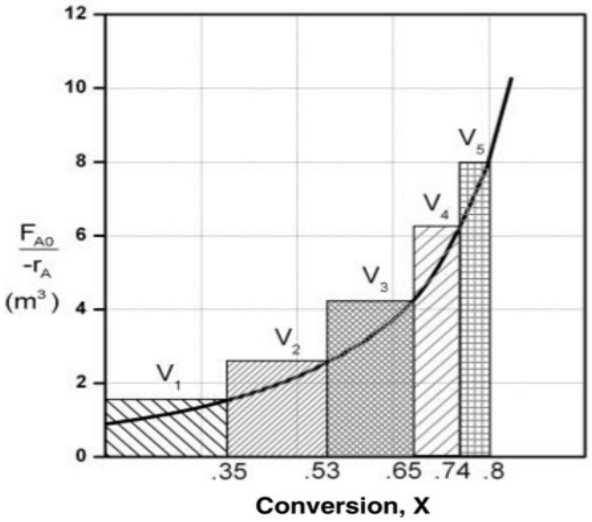
② PFR in Series



$$\int_0^{X_2} F_{A0}\frac{dX}{-r_A} = \int_0^{X_1} F_{A0}\frac{dX}{-r_A} + \int_{X_1}^{X_2} F_{A0}\frac{dX}{-r_A}$$

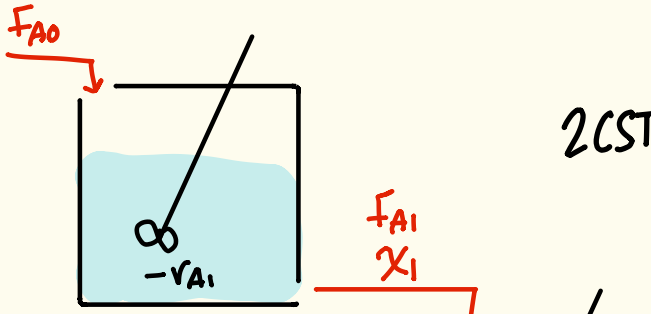


A one PFR can be modeled by a large number of CSTRs



هي هي نفسها لما يكون عندي
Performance اياه كبير نفس ال

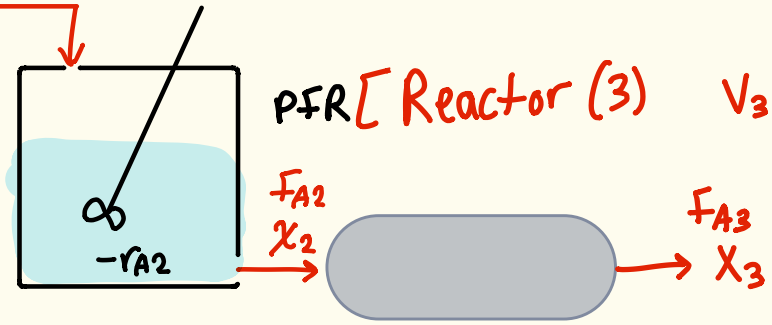
※ Combination of CSTRs and PFRs in Series



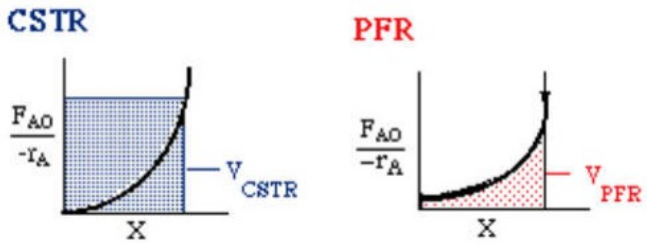
2CSTR [Reactor (1) $V_1 = \frac{F_{A0}\,X}{-r_{A1}}$

Reactor (2) $V_2 = \frac{F_{A0}\,(X_2 - X_1)}{-r_{A2}}$

PFR [Reactor (3) $V_3 = \int_{X_2}^{X_3} \frac{F_{A0}}{-r_A}\,dX$



※ Comparing CSTR & PFR Sizing

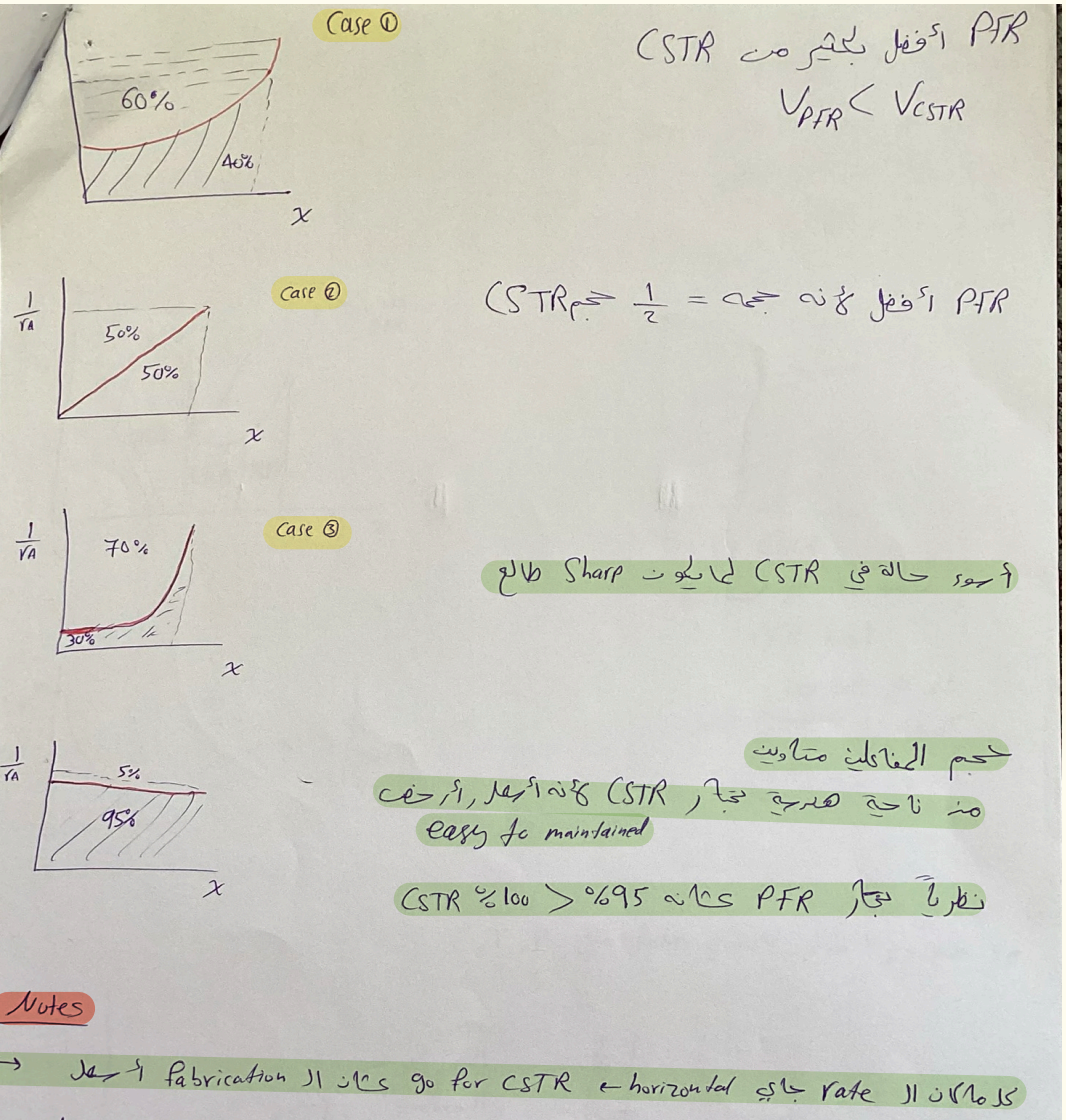


$V_{CSTR} > V_{PFR}$ for the same conversion and rxn conditions.

The reason is that CSTR always operates at lowest rxn rate. PFR starts at a high rate, then gradually decreases to the exit rate.

الـPFR سريع فبيحتاج الى حجم اصغر لإتمام نفس التفاعل

Graphical interpretation of reactor sizing



الحجم تبع الـ PFR هو عبارة عن المساحة تحت المنحنى

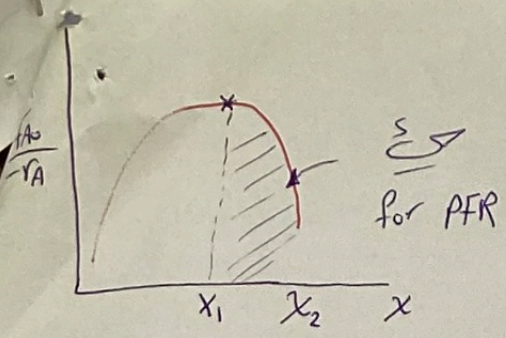
اما الـ CSTR فالحجم له هو عبارة عن المساحة تحت وفوق المنحنى

لما يكون ال $\frac{1}{r_A}$ Curve

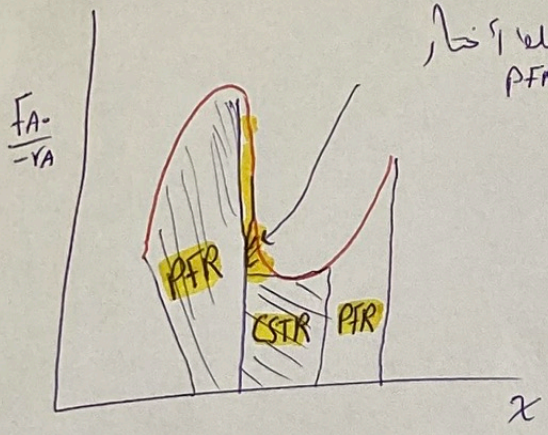
طالع جبل Sharp اختار

PFR ، اذا كان نازل بجبل

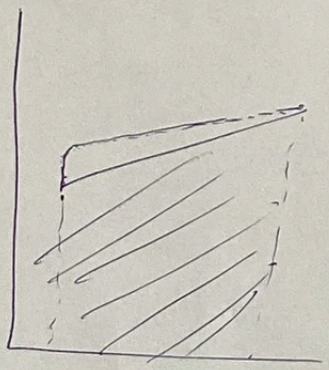
CSTR اختار Sharp



حيث for PFR



كلما زاد اختار PFR



go for CSTR

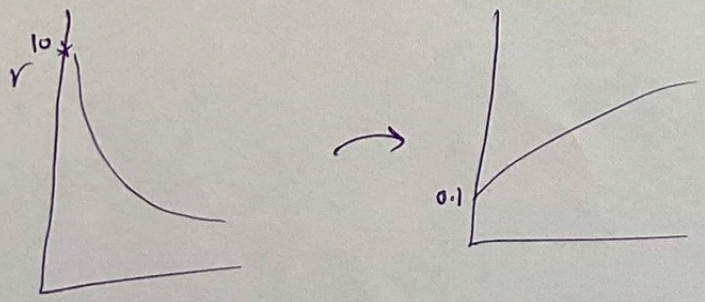
حسب Chemical . E

PFR best

كل كلما real life

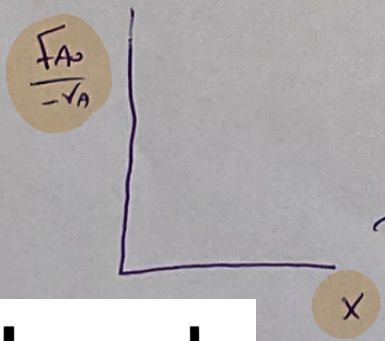
كمهندس CSTR افضل

بالامتحان بقله PFR



ليش ال rate

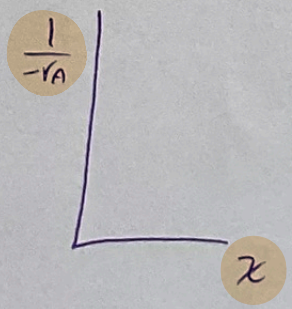
مرا طالع وهاا نازل ، لانه في factors مثل C, T, P



الحجم يكون

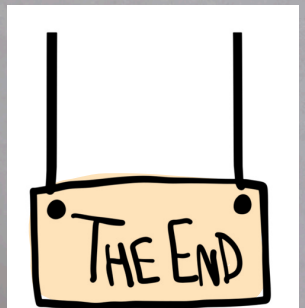
المساحة

تحت المنحنى



المساحة هون بتقولي

$\frac{dx}{r_A}$ فلازم اضربها بـ F_{A_0} لأحصل على الحجم



Isothermal parallel CSTRs and PFR

Topic7

"These are the topics we will cover."

1. Performance of Isothermal CSTRs in Parallel
2. Performance of PFRs in Parallel
3. Pressure Drop in Gas-Phase Catalytic Reactors (PBR)

Coupled Differential Equations

$\frac{dX}{dW}$ with the Ergun Equation $\frac{dP}{dW}$ to account for pressure

4. Analytical Solution for Pressure Profile

Assuming negligible expansion $\epsilon X \approx 0$

and constant temperature (isothermal conditions).

catalyst mass $\frac{P}{P_0} = (1 - \alpha W)^{1/2}$

5. Effect of Pressure Drop ΔP on Reactor Performance

Lower Concentration and Rate: Pressure drop reduces total pressure (P), which directly lowers reactant concentration (CA) and reaction rate (-rA).

Reduced Conversion: The lower reaction rate leads to a reduced overall conversion X for a given catalyst weight W

Increased Volumetric Flow: Pressure drop causes gas expansion

Isothermal ← درجة الحرارة داخل المفاعل تبقى ثابتة طوال فترة التفاعل $(T = T_0)$ ، كيف منحافظ على الحرارة ثابتة؟؟؟

← اذا كان التفاعل endothermic أو exothermic منستخدم نظام تبريد أو تسخين خارجي مثل Cooling Jacket لسحب الحرارة أو تعويض الحرارة.

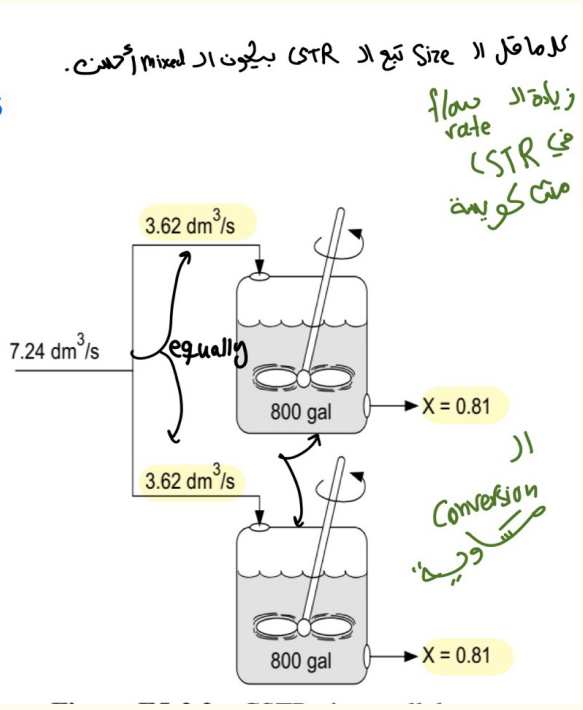
← أهميتها في الحسابات ثبات (K) $K = Ae^{-\frac{E}{RT}}$ لأنه T ثابتة

و لا نحتاج الى معادلة الـ Energy Balance بس بدي معادلة الـ design

1. Performance of Isothermal CSTRs in Parallel

لما يكون عندي عدد n من CSTR موصولين بالتوازي

يتم تقسيم التدفق والحجم الكلي بالتساوي على عدد المفاعلات



وبأنه التدفق والحجم متساويات

$$X_1 = X_2 = X_3 = X_n$$

$$r_{A_1} = r_{A_2} = r_{A_3} = r_{An}$$

$$V = \frac{F_{A0}}{-r_A} X$$

Conclusion

"لو عندي نظام مكون من عدة CSTR n متماثلة وموصولة على التوازي بحجم كلي V تعطي نفس نسبة التحول X اللي بيعطيني ياها مفاعل CSTR 1 الـ نفس الحجم الكلي V وكمية التدفق الكلية F_{A0}.

طيب وين فائدة الـ parallel ؟؟؟

لـ بالمُقابل الـ لما يكون عندي كمية تدفق عالية جداً F_{A0} لتوزيع الحمل

معلش تحليلي طيب ليش ما أروح على Series في حالة التدفق العالي ؟؟

لما يدخل التدفق بشكل كبير في مفاعل واحد أو مفاعلات على شكل Series سرعة المائع بتصير عالية جداً

فبيصير عندي هبوط بشكل كبير خصوصاً بالمفاعلات الأنبوبية PBR, PFR وهبوط الضغط يعني زيادة الحجم فبقل التركيز و بينخرب الـ Conversion

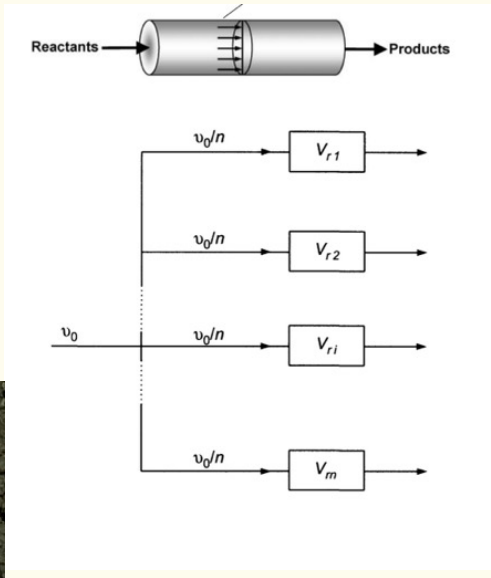
من ناحية الصيانة

في حالة الـ Series: لو صار انسداد أو مشكلة بمفاعل واحد، الخط كامل بوقف

في حالة الـ Parallel: لو صار عطل بمفاعل، بتعمله عزل (Bypass) وبتروح بتعمله صيانة، بينما بقية المفاعلات شغالة والإنتاج مستمر.

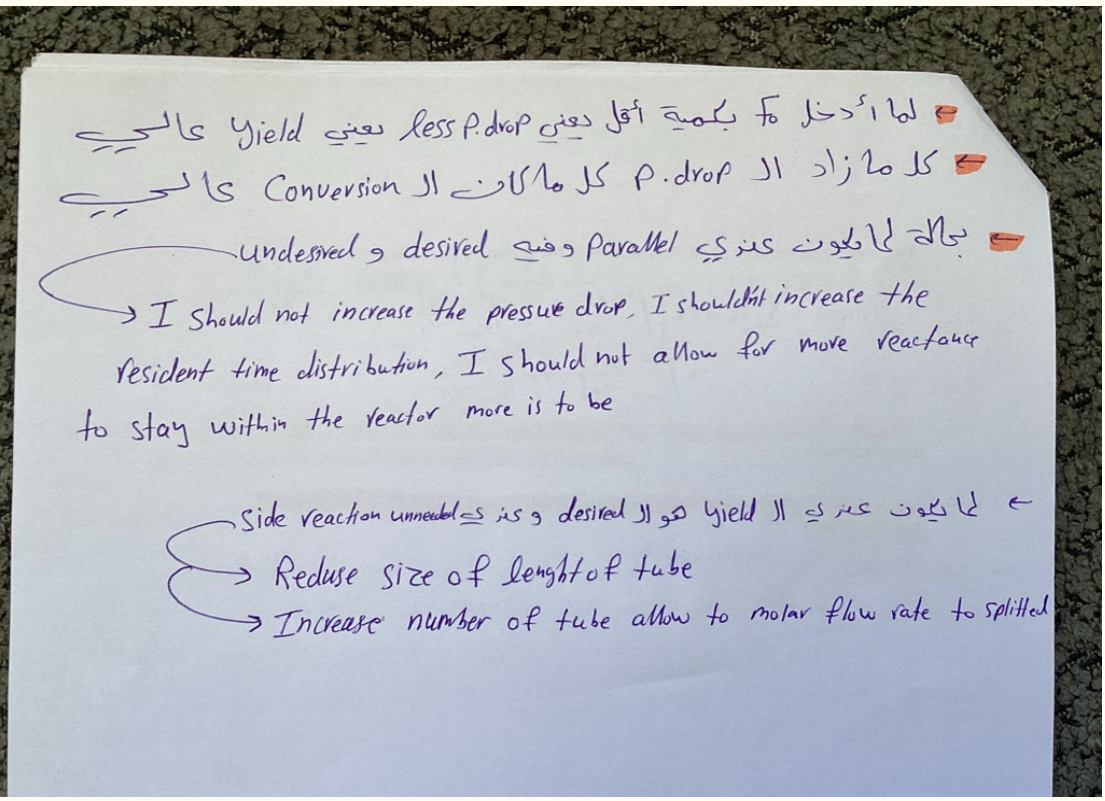
الـ Series بنستخدمه عشان نرفع الـ Conversion، بس الـ Parallel بنستخدمه لما يكون عندنا Flow Rate ضخم ما بيتحمله مفاعل واحد لا ميكانيكياً ولا هيدروليكياً بسباب هبوط الضغط وحجم المفاعل."

2. Performance of PFRs in Parallel



The conversion will be the Same

أهميتها تقليل هبوط الضغط



3. Pressure Drop in Gas-Phase Catalytic Reactors (PBR)

$$-r_A = K C_A^2$$

gas phase reaction 2nd order in catalytic reaction

$$-r_A = K\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)\right]^2$$

بما انه جبت gas معادلة الـ Concentration تبعته من Topic 3

$$\frac{dF_A}{dw} = K\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)\right]^2$$

Assume Isothermal

$$\frac{d(F_{A0}(1-X))}{dw} = K\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\left(\frac{P}{P_0}\right)\right]^2$$

$$\frac{dF_{A0}X}{dw} = K\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\left(\frac{P}{P_0}\right)\right]^2$$

$$\frac{C_{A0}v_0\,dx}{dw} = K\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\left(\frac{P}{P_0}\right)\right]^2$$

$$\frac{dx}{dw} = \frac{KC_{A0}}{v_0}\left[\frac{(1-X)}{(1+\varepsilon X)}\left(\frac{P}{P_0}\right)\right]^2$$

المعادلة الناتجة بدلالة متغيرين two dependent Variable

(X) (P)

ف بدي كمان معادلة

اللي هي "Ergun equation"

$$\frac{dX}{dW} = F_1(X, P)$$

$$\frac{dP}{dW} = -\frac{\beta_0}{A_c(1-\phi)\rho_c}\cdot\left(\frac{P_0}{P}\right)\cdot\left(\frac{T}{T_0}\right)\cdot\left(\frac{F_T}{F_{T0}}\right)$$

معادلة "Ergun" بصورتها العامة

تم اشتقاقها من هون

$F_T = F_{T0} + \delta F_{A0}X$

$$\frac{F_T}{F_{T0}} = 1 + \epsilon X$$

$$p = \frac{P}{P_0}$$

Notation of Ergun's equation

P = pressure, lb_f/ft^2 or (kPa)

ϕ = porosity = $\frac{\text{volume of void}}{\text{total bed volume}}$ = void fraction

$1-\phi$ = $\frac{\text{volume of solid}}{\text{total bed volume}}$

g_c = 32.174 $lb_m \cdot ft/s^2 \cdot lb_f$ (conversion factor) = $\left(\frac{1\ Kg \cdot m}{N \cdot s^2}\right)$

= $4.17 \times 10^8\ lb_m \cdot ft/h^2 \cdot lb_f$

(Recall that for the metric system $g_c = 1.0$)

D_p = diameter of particle in the bed, ft or (m)

μ = viscosity of gas passing through the bed, $lb_m/ft \cdot h$ or $(kg/m \cdot s)$

z = length down the packed bed of pipe, ft or (m)

u = superficial velocity = volumetric flow rate ÷ cross-sectional area of pipe, ft/h or (m/s)

ρ = gas density, lb_m/ft^3 or (kg/m^3)

$G = \rho u$ = superficial mass velocity, $(lb_m/ft^2 \cdot h)$ or $(kg/m^2 \cdot s)$

3 $$\frac{dp}{dW} = -\frac{\alpha}{2p}(1+\epsilon X)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

2 $$\alpha = \frac{2\beta_0}{A_c\rho_c(1-\phi)P_0}$$

1 $$\beta_0 = \frac{G(1-\phi)}{\rho_0 g_c D_p \phi^3}\left[\frac{150(1-\phi)\mu}{D_p} + 1.75G\right]$$

بحسب $\frac{dp}{dw} \leftarrow \alpha \leftarrow \beta$

$$\frac{dX}{dW} = \frac{kC_{A0}}{v_0}\left(\frac{1-X}{1+\epsilon X}\right)^2 p^2$$ "design"

$$\frac{dp}{dW} = -\frac{\alpha}{2p}(1+\epsilon X)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$ "Ergun"

حلول المعادلتين بينحلو مع بعض باستخدام الـ Poly math Simplification بس لو بدي أحلهم لازم Analytical أحل "Ergun".

1+εX ①

εX / قيمة كسرية / قيمة كسرية

كسر * كسر رح يعطيني كسر أصغر قيمته مهملة متازنة بالواحد.

4. Analytical Solution for Pressure Profile

② Assume isothermal $\left(\frac{T}{T_0}\right) = 1$

$$\frac{dp}{dW} = -\frac{\alpha}{2p}$$

$$\int_1^p 2p\,dp = -\alpha \int_0^W dW$$

$$p^2 - 1 = -\alpha W \Longrightarrow p^2 = 1 - \alpha W$$

$$p = \frac{P}{P_0} = (1-\alpha W)^{1/2}$$

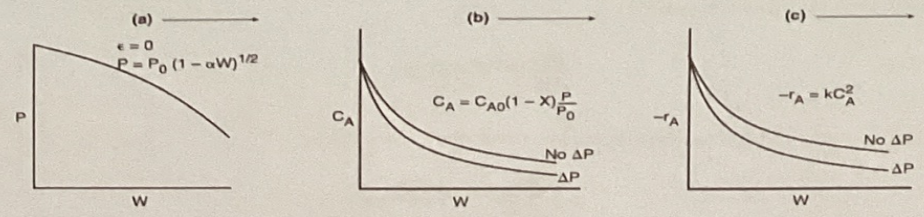
$$W = A_c\rho_c(1-\phi)z \qquad \alpha = \frac{2\beta_0}{A_c\rho_c(1-\phi)P_0}$$

$$p = \frac{P}{P_0} = \left(1 - \frac{2\beta_0 z}{P_0}\right)^{1/2}$$

$$z = \frac{W}{A_c(1-\phi)\rho_c}$$ الطول

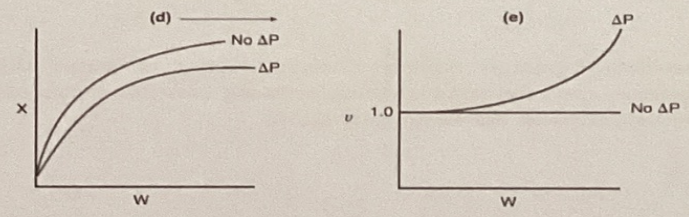
5. Effect of Pressure Drop ΔP on Reactor Performance

Variation of conversion, concentration, pressure and rate of reaction as a function of weight of catalyst



more catalyst
more P.drop

P↓ V↑
C↓ r↓



كل ما زدت الـ x كل ما زدت الـ W كل ما زدت ؛ بس لحد معين

P↓ V↑

عشان صيلد بالجاه لـ Parallel

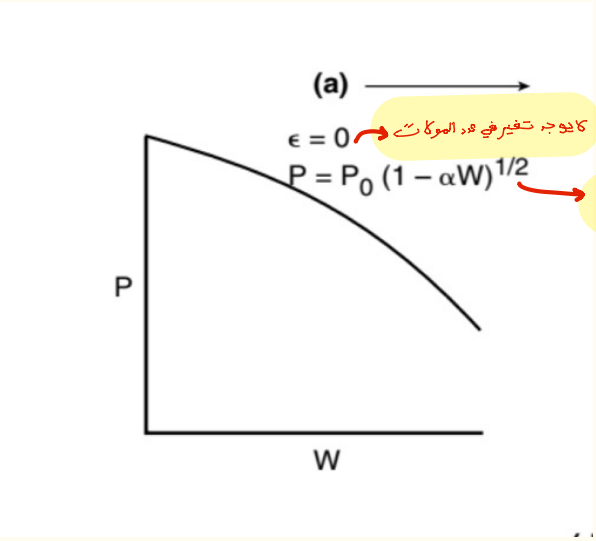
10 bar — 10m — 0.5 bar — ΔP = 9.5 ← Conversion is Max. — yield Min

10 bar — 9m — 3 bar — ΔP = 7

10 bar — 8m — 6 bar — ΔP = 4 ← Conversion is Min — yield Max

$PV = nRT$

T↑ يعني V زيادة
يعني P↓
عشان صيلد
نقصلهم



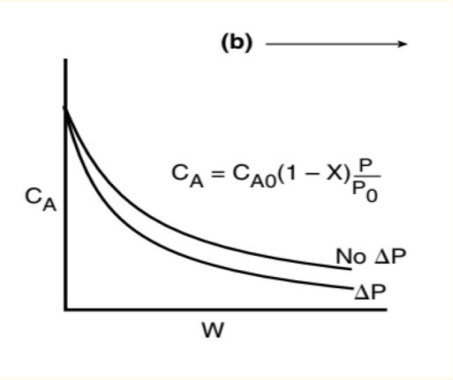
كل ما زاد وزن W يعني زاد طول المفاعل

بالتالي يقل الضغط

كاديوجد تغير في قد السرعات

معادلة Ergun.

$No\ \Delta P \rightarrow \frac{P}{P_0} = 1$



بس لما يكون عندي pressure drop

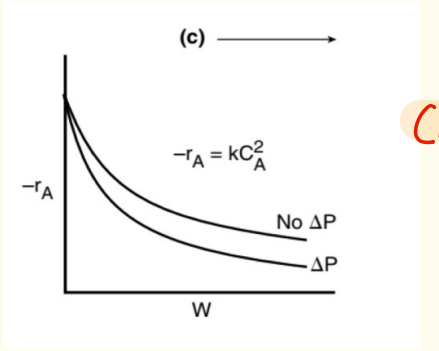
بينخفض التركيز لسببين

استهلاك المادة في التفاعل ← $(1-X)$

انخفاض الضغط يعني زيادة الحجم

يعني الجزيئات متفرقة أكثر فالتركيز

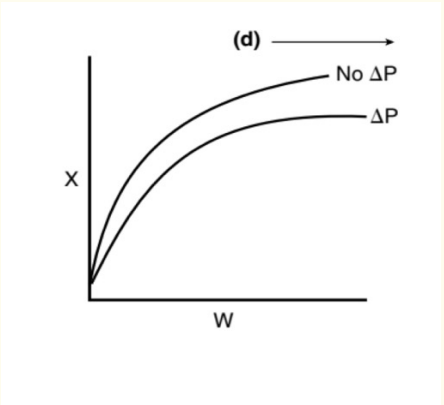
يعني, كان هيك لما يكون عندي ΔP المنحنى بيكون منخفض أكثر من $No\ \Delta P$



بما انه الـ Rate يعتمد على الـ Concentration

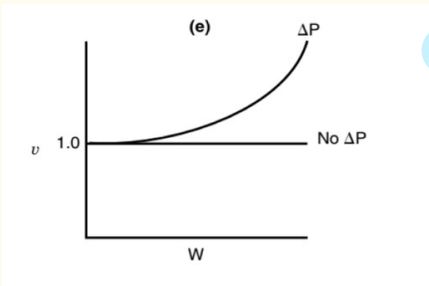
التركيز أكبر ← الـ r_A أكبر ← $No\ \Delta P$

التركيز أقل ← الـ r_A أقل ← ΔP



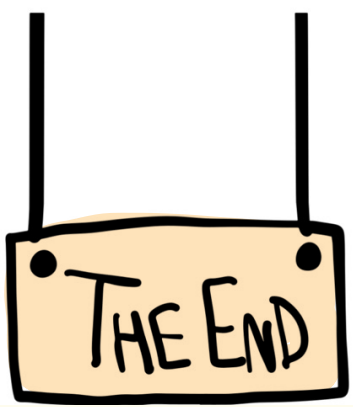
$No\ \Delta P \leftarrow TC \leftarrow Tr$ بالتالي الـ X عالية

$\Delta P \leftarrow C \downarrow \leftarrow r \downarrow$ بالتالي الـ X قليلة



ΔP ← نقصان في الضغط ← زيادة في الحجم

$No\ \Delta P$ ← الضغط ثابت بالتالي لا يوجد تغير في الحجم ويكون خط أفقي ثابت



Multiple Reactions

Topic 9

"These are the topics we will cover."

1. Types of Multiple Reactions:

Parallel reactions
Series reactions
Independent reactions
Complex reactions

2.Selectivity — Instantaneous $S_{D/U} = r_D/r_U$ — Overall $\tilde{S}_{D/U} = F_D/F_U$

3.Yield — Instantaneous $Y_D = r_D/-r_A$ — Overall $\tilde{Y}_D = F_D/(F_{A0} - F_A)$

4.How to Maximizing Selectivity

Concentration Effects:

Case 1 $\alpha_1 > \alpha_2$ High CA using PFR or Batch.

Case 2 $\alpha_2 > \alpha_1$ Low CA using CSTR and feed

Temperature Effects:

Case 3 $E_D > E_U$ High temperature

Case 4 $E_U > E_D$ Low temperature

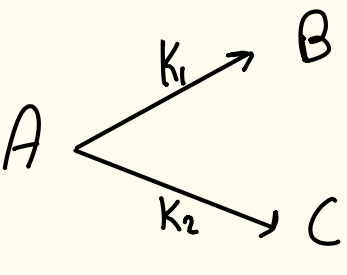
بـ Single reaction كنا نربط الـ C مع X

but If I have multiple reaction use molar flow rates.

1.Types of reactions

بـ multiple reaction بتحكم بـ resident time distribution اللي على مزوته بحصّل الـ max من اللي بدي ياه.

(A) parallel reactions



بنفس الوقت بتعطيني B و C.

(B) Series reaction

$$A \xrightarrow{K_1} B \xrightarrow{K_2} C$$

(C) Independent parallel reactions

$$A \longrightarrow B + C$$

$$D \longrightarrow E + F$$

تفاعلات تحدث داخل المفاعل دون أي تداخل كيميائي لكنها تتنافس على المساحة النشطة لسطح الـ catalyst مما يقلل مردود التفاعل المطلوب "desired"

(d) Complex reactions

$$A + B \rightarrow C + D \quad] D$$

$$A + C \rightarrow E \quad] U$$

$$E \rightarrow G \quad] U$$

In chemical processes (whether parallel or series), the goal is to maximize the desired product (D) while minimizing the undesired product (U).

2.Selectivity

$$A \xrightarrow{K_o} D \xrightarrow{K_u} U$$

كثير من التفاعلات الصناعية التفاعل لا يعطينا ناتج واحد فقط

فيه desired product وهو اللي بدي ياه و بربح منه

وفيه undesired product وهاي ما بدي يا ها.

الطرف أز يد كمية D قد ما بقدر وأقلل قيمة U قد الإمكان

Selectivity

بتقارن بين كمية الـ D وكمية U

وهي نوعين ①

① instantaneous

② overall

※ Instantaneous

$$S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{\text{rate of formation of D}}{\text{rate of formation of U}}$$

تُقاس عند أي لحظة زمنية داخل المفاعل

بناءً على سرعة التفاعل.

※ overall

$$\tilde{S}_{D/U} = \frac{F_D}{F_U} = \frac{\text{Exit molar flow rate of desired product}}{\text{Exit molar flow rate of undesired product}}$$

تقاس عند مخرج المفاعل

Special case

$$\tilde{S}_{D/U} = \frac{N_D}{N_U}$$

for batch reactor

كمان ما عندي flow rate ※

3.Yield

$A \xrightarrow{K_D} D \xrightarrow{K_U} U$

الانتاجية
وهي تقارن بين الناتج المرغوبة وبين المادة المتفاعلة المستهلكة

※ Instantaneous

$$Y_D = \frac{r_D}{-r_A}$$

※ overall

$$\tilde{Y}_D = \frac{F_D}{F_{A0} - F_A}$$

$F_{A0} - F_A$ → moles of A reactant consumed

Special case

$$\tilde{Y}_D = \frac{N_D}{N_{A0} - N_A}$$

for batch reactor
كثافة ما عندي flow rate ✗

Special Case for Continuous Stirred-Tank Reactors (CSTRs):

In a CSTR, due to perfect mixing, the concentrations of reactants and products are completely uniform throughout the entire reactor volume and are identical to the exit stream concentrations $C_{i,\text{reactor}} = C_{i,\text{exit}}$

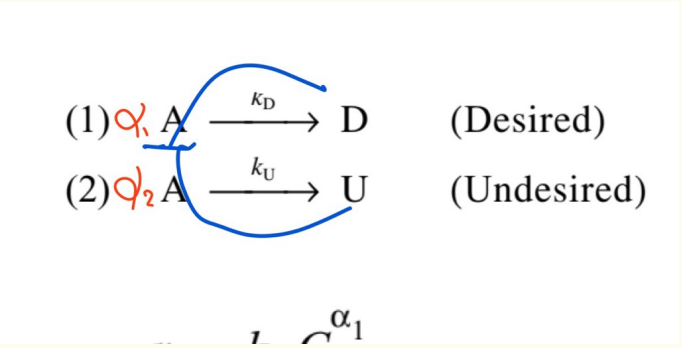
Consequently, the instantaneous reaction rates (rD, rU, and -rA) are constant everywhere inside the reactor and are evaluated strictly at the exit conditions.

في S_{oD} ، S_{oU} متساويين ، Y_D ، $\tilde{Y}_D$ متساويين

4.How to Maximizing Selectivity

$\alpha_1 A \xrightarrow{K_D} D$

$\alpha_2 A \xrightarrow{K_U} U$



$r_D = K_D C_A^{\alpha_1}$

$r_U = K_U C_A^{\alpha_2}$

$-r_A = K_D C_A^{\alpha_1} + K_U C_A^{\alpha_2}$

$$S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} C_A^{\alpha_1 - \alpha_2}$$

$$Y_D = \frac{r_D}{-r_A} = \frac{k_D C_A^{\alpha_1}}{k_D C_A^{\alpha_1} + k_U C_A^{\alpha_2}}$$

الحالة الأولى هي اذا كانت $\alpha_1 > \alpha_2$

يعني رتبة التفاعل المرغوب أعلى من غير المرغوب

لزيادة قيمة الـ Selectivity لازم أخلي تركيز C_A أعلى ما يمكن

نوع الـ Reactors اللي بستخدمه (PFR) أو Batch

لا لا نستخدم CSTR ✗ لأن التركيز داخله يكون دائماً عند أدنى قيمة له.

PFR هذا
لا (عالي طول ماحجمه ماخي تقريباً

الحالة الثانية هي اذا كانت $\alpha_2 > \alpha_1$

يعني رتبة التفاعل غير المرغوب أعلى من المرغوب ، لزيادة الـ Selectivity لازم أخلي قيمة الـ C_A أقل ما يمكن الـ Reactor اللي بستخدمه هو CSTR مع dilute feed

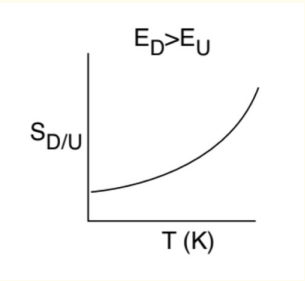
تأثير درجة الحرارة على الـ Selectivity

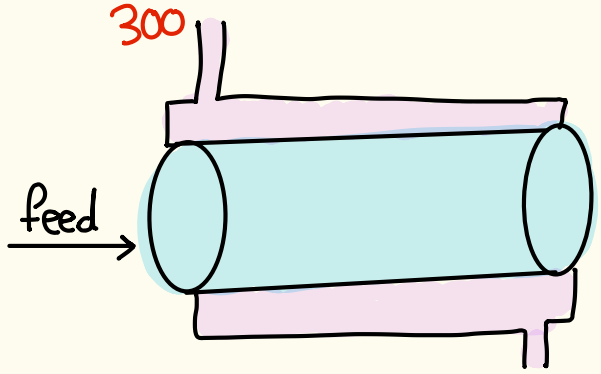
لـ بيعتمد تأثيره على المقارنة بين طاقات التنشيط "Activation energy"

$$S_{D/U} = \frac{k_D}{k_U} = \frac{A_D}{A_U} e^{-\frac{E_D - E_U}{RT}}$$ بناءً على معادلة أرهينيوس E_u ، E_D

الحالة الثالثة: $E_D > E_u$

طاقة التنشيط للتفاعل المرغوب أكبر، يعني بدي حرارة أعلى عشان يصير الـ Rate تبع الـ desired أسرع فنعمل Sharp Shock of Heat by Co-current



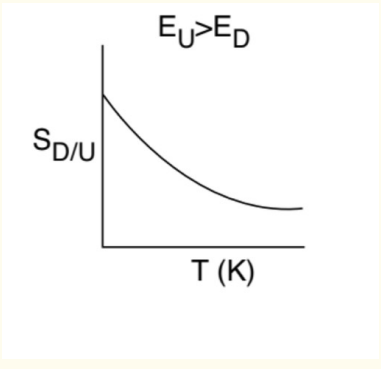


من عالي أرفع T قد ما بقدر

الحالة الرابعة: $E_u > E_D$

طاقة التنشيط للتفاعل غير المرغوب عالية

أحسنلي بشتغل على درجة حرارة منخفضة، عشان ما أعطي مجال لـ undesired يكون بشكل كبير.



EXAMPLE 9.1

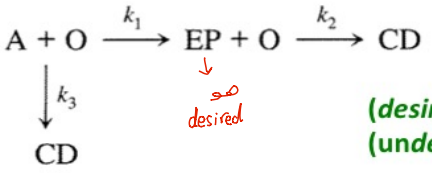
The following reactions are observed when an olefin is epoxidized with oxygen:

$$\text{alkene} + O_2 \longrightarrow \text{epoxide}$$
$$\text{epoxide} + O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O$$
$$\text{alkene} + O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O$$

Calculate the maximum epoxide selectivity assuming an excess of dioxygen.

Solution

The reaction network is assumed to be:



A: alkene
O: oxygen
EP: epoxide
CD: carbon dioxide
(*desired*)
(*undesired*)

$$-r_A = k_1 C_A C_O + k_3 C_A C_O$$

$$r_{EB} = k_1 C_A C_O - k_2 C_{EB} C_O$$

$$r_{CD} = k_2 C_{EP} C_O + k_3 C_A C_O$$

سحبت C_O عامل مشترك واختصرته

$$S_{D/U} = \frac{K_1 C_A - K_2 C_{EB}}{K_2 C_{EB} + K_3 C_A}$$

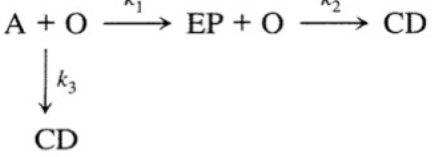
الهدف أزيد البسط وأقلل المقام كيف أزيد S

① تقليل تركيز C_{EB} $C_{EB} \approx 0$
عن طريق اني أعمله فورا ناتجه

$$S = \frac{K_1 C_A - 0}{K_3 C_A}$$

$$S = \frac{K_1}{K_3}$$

③ اذا كانت قيمة $E_3 < E_1$ برفع الحرارة فيزداد قيمة K_1
اذا كانت قيمة $E_3 > E_1$ بخفض الحرارة فيقل قيمة K_3



Instantaneous Selectivity

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U}$$

$$S_{D/U} = \frac{r_{EB}}{r_{CD}} = \frac{k_1 C_A C_O - k_2 C_{EB} C_O}{k_2 C_{EP} C_O + k_3 C_A C_O}$$

$$-r_A = k_1 C_A C_O + k_3 C_A C_O$$

$$r_{EB} = k_1 C_A C_O - k_2 C_{EB} C_O$$

$$r_{CD} = k_2 C_{EP} C_O + k_3 C_A C_O$$

Instantaneous Yield

$$Y_D = \frac{r_D}{-r_A}$$

$$Y_D = \frac{r_{EB}}{-r_A} = \frac{k_1 C_A C_O - k_2 C_{EB} C_O}{k_1 C_A C_O + k_3 C_A C_O}$$

EXAMPLE 9.2

Maximizing the Selectivity for the Famous Trambouze Reactions

Reactant A decomposes by three simultaneous reactions to form three products, one that is desired, B, and two that are undesired, X and Y. These gas-phase reactions, along with the appropriate rate laws, are called the *Trambouze reactions* (*AIChE J., 5*, 384).

1) undesired $A \xrightarrow{k_1} X$ (Zero order reaction) $\quad -r_{1A} = r_X = k_1 = 0.0001 \dfrac{\text{mol}}{\text{dm}^3 \cdot \text{s}}$

2) desired $A \xrightarrow{k_2} B$ (1st) $\quad -r_{2A} = r_B = k_2 C_A = (0.0015\ s^{-1}) C_A$

3) undesired $A \xrightarrow{k_3} Y$ (2-nd) $\quad -r_{3A} = r_Y = k_3 C_A^2 = \left(0.008 \dfrac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}}\right) C_A^2$

The specific reaction rates are given at 300 K and the activation energies for reactions (1), (2), and (3) are $E1$ = 10,000 kcal/mole, $E2$ = 15,000 kcal/mole, and $E3$ = 20,000 kcal/mole.

How, and under what conditions (e.g., reactor type(s), temperature, concentrations), should the reaction be carried out to maximize the selectivity of species B for an entering concentration of species A of 0.4 M and a volumetric flow rate of 2.0 dm³/s?

Solution

Instantaneous Selectivity

Rate of desired

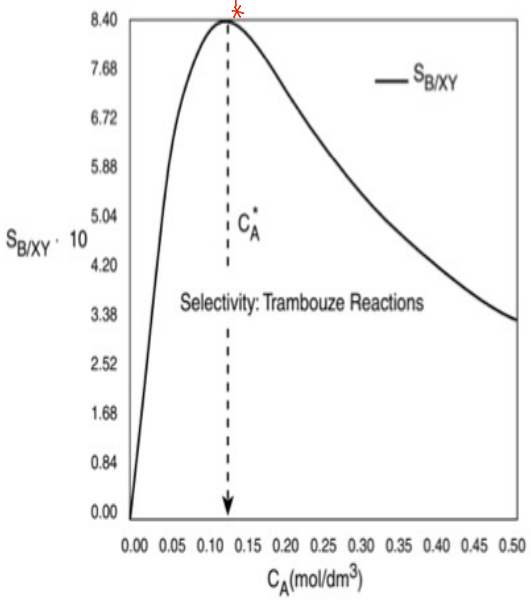
$$s_i = \frac{r_i}{\sum r_j}, \quad j = 1, \cdots, \text{all products of interest}$$

undesired ال كل ← كل

The instantaneous selectivity of species B with respect to species X and Y is

$$S_{B/XY} = \frac{r_B}{r_X + r_Y} = \frac{k_2 C_A}{k_1 + k_3 C_A^2}$$

optimum اي بشتغل عندها



When we plot $S_{B/XY}$ vs. C_A, we see that there is a maximum

To find the maximum, C_A^*, we differentiate $S_{B/XY}$ with respect to C_A, set the derivative to zero, and solve for C_A^*. That is

$$\frac{dS_{B/XY}}{dC_A} = 0 = \frac{k_2[k_1 + k_3 C_A^{*2}] - k_2 C_A^* [2k_3 C_A^*]}{[k_1 + k_3 C_A^{*2}]^2} \Longrightarrow C_A^* = \sqrt{\frac{k_1}{k_3}} = \sqrt{\frac{0.0001(\text{mol/dm}^3 \cdot \text{s})}{0.008\ (\text{dm}^3/\text{mol} \cdot \text{s})}} = 0.112\ \text{mol/dm}^3$$

Selectivity بدنا قانون 1

$C_{A\,max}^*$ بشتق وبساوي بالصفر كديك 2

$$K_2\left[K_1 + K_3 C_A^2\right] = K_2 C_A \left[2 K_3 C_A\right]$$

$$K_1 + K_3 C_A^2 = C_A^2 2K_3$$

$$K_1 = 2C_A^2 K_3 - K_3 C_A^2$$

$$K_1 = C_A^2 K_3$$

$$C_A = \sqrt{\frac{K_1}{K_3}}$$

Therefore, to maximize the selectivity $S_{B/XY}$, we want to carry out our reaction in such a manner that the CSTR concentration of A is always at C_A^*. The corresponding selectivity at C_A^* is

$$S_{B/XY} = \frac{k_2 C_A^*}{k_1 + k_3 C_A^{*2}} = \frac{k_2 \sqrt{\frac{k_1}{k_3}}}{k_1 + k_1} = \frac{k_2}{2\sqrt{k_1 k_3}} = \frac{0.0015}{2[(0.0001)(0.008)]^{1/2}}$$

$$\boxed{S_{B/XY} = 0.84}$$

في الـ CSTR، يتم خلط المكونات بشكل(Perfectly Mixed)، مما يجعل التركيز داخل المفاعل بالكامل وعند المخرج ثابتًا دائمًا ومساويًا لـ CA* طوال فترة التشغيل. هذا يضمن أن التفاعل يتم بأكمله عند أقصى كفاءة

ملاحظة موجودة هاي ب topic 2

Maximize the selectivity with respect to temperature

From previous part we had $S_{B/XY} = \frac{r_B}{r_X + r_Y} = \frac{k_2 C_A}{k_1 + k_3 C_A^2}$ and $C_A^* = \sqrt{\frac{k_1}{k_3}}$

Substitute the second term in the first one

$$S_{B/XY} = \frac{k_2 C_A^*}{k_1 + k_3 C_A^{*2}} = \frac{k_2 \sqrt{\frac{k_1}{k_3}}}{k_1 + k_1} = \frac{k_2}{2\sqrt{k_1 k_3}} \quad \text{or} \quad S_{B/XY} = \frac{A_2}{2\sqrt{A_1 A_3}} \exp\left[\frac{\frac{E_1 + E_3}{2} - E_2}{RT}\right]$$

Case 1: If $\frac{E_1 + E_3}{2} < E_2$ { Run at as high a temperature as possible with existing equipment and watch out for other side reactions that might occur at higher temperatures

Case 2: If $\frac{E_1 + E_3}{2} > E_2$ { Run at low temperatures but not so low that a significant conversion is not achieved

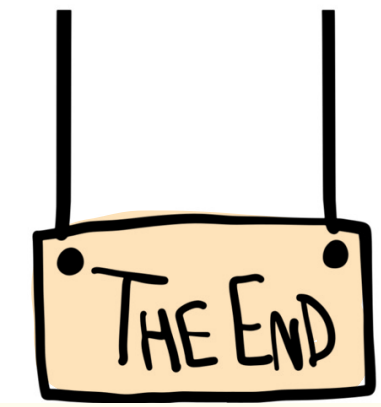
For the activation energies given in this example

$$\frac{E_1 + E_3}{2} - E_2 = \frac{10,000 + 20,000}{2} - 15,000 = 0$$

So the selectivity for this combination of activation energies is independent of temperature!

What is the conversion of A in the CSTR?

$$X^* = \frac{C_{A0} - C_A^*}{C_{A0}} = \frac{0.4 - 0.112}{0.4} = 0.72$$



Multiple Reactions Reactor selection and design

Topic 10

"These are the topics we will cover."

1- Operating conditions

2- Reactor Selection Cases

3- Design of a batch and PFR for a series of reactions

※ Operating Condition

1. Safety ⇝ عن طريق التحكم بالحرارة والضغط
2. Selectivity ⇝ زيادة انتاج المادة المرغوبة وتقليل المواد الجانبية
3. Yield ⇝ زيادة الانتاج عن طريق الإستغلال الأمثل للمواد المتفاعلة
4. Temperature Control ⇝ زيادة الحرارة أو تقليلها حسب التفاعل
5. Cost ⇝ الكلفة التشغيلية

※ Reactor Selection cases

$$r_D = k_1 C_A^{\alpha_1} C_B^{\beta_1}$$

$$A + B \xrightarrow{K_D} D$$

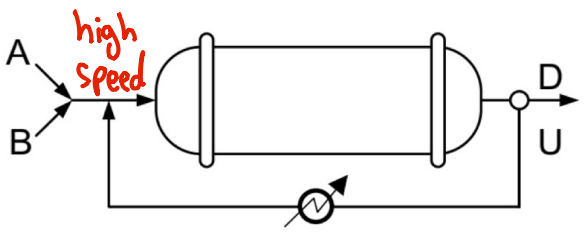
$$r_U = k_2 C_A^{\alpha_2} C_B^{\beta_2}$$

$$A + B \xrightarrow{K_U} U$$

$$S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1 - \alpha_2} C_B^{\beta_1 - \beta_2}$$

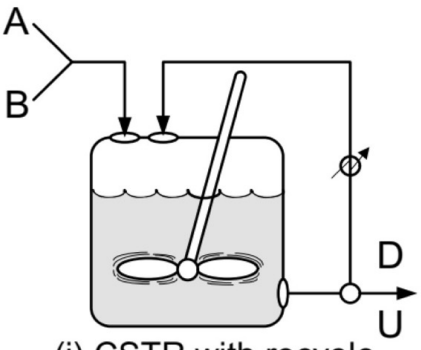
Case ① if the reactions are highly exothermic

If the Desired is exothermic and the Undesired is endothermic: Use recycle stream



(i) Tubular reactor with recycle

If the Desired is endothermic and Undesired is exothermic, use CSTR alone



(j) CSTR with recycle

Case ② for reversible reaction

$$A + B \rightleftharpoons C + D$$

نعتمد على مبدأ لوشاتلييه

Equilibrium lies far to the left اذا كان

فان التفاعل العكسي يحدث مما يقلل من التفاعل الأمامي فتقل X وتقل الـ Yield

نعتمد على مبدأ لوشاتلييه

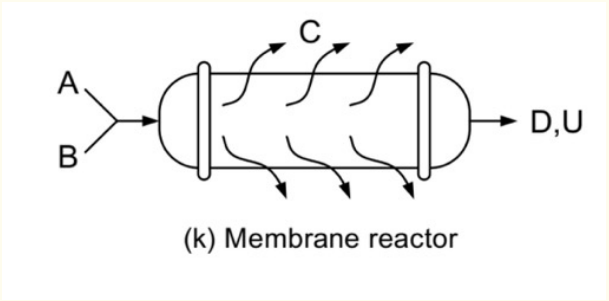
إذا سحبنا أحد النواتج مثلاً المادة (C) بشكل مستمر أثناء حدوث التفاعل، فإن التفاعل يُجبر على انو يروح نحو اليمين (جهة النواتج) لتعويض المادة المسحوبة، وبالتالي تزداد X

Gas Phase vs. Liquid Phase

Gas Phase

← يستخدم الـ Membrane reactor

يحتوي المفاعل على غشاء عند تفاعل A و B وتكوين C و D يسمح الغشاء للمادة C فقط بالنفاذ والمرور من خلاله للخارج بالتالي التفاعل رح يتحرك للأمام وأنا هيك بدي



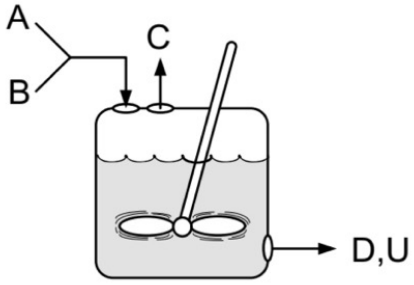
(k) Membrane reactor

المفاعل المستخدم: Reactive Distillation Reacto

liquid phase

← يستخدم Reactive distillation reactor

الشرط الأساسي تكون المادة اللي بدي أفصلها مثلاً C Higher Volatility يعني درجة غليان أقل مقارنة بباقي المواد في المفاعل, أثناء حدوث التفاعل تتبخر المادة C الأسرع تطايرًا وتتصاعد الى الأعلى لتسحب من أعلى المفاعل كبخار, النتيجة يقل تركيز C فالتفاعل بيروح تلقائيًا نحو اليمين لتكوين المزيد من النواتج



(l) Reactive distillation

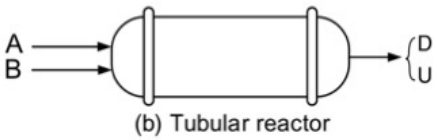
Example 10.1 Choice of Reactor and Conditions to Minimize Unwanted Products

Given the following parallel reactions. Find all possibilities of configuration and pathways to increase the selectivity of the desired product.

$$\alpha_1 A + B \xrightarrow{\theta_1} D: \qquad r_D = k_1 C_A^{\alpha_1} C_B^{\beta_1}$$

$$\alpha_2 A + B \xrightarrow{\theta_2} U: \qquad r_U = k_2 C_A^{\alpha_2} C_B^{\beta_2}$$

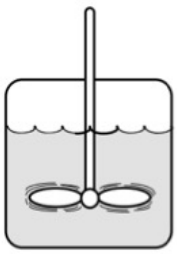
Solution



(b) Tubular reactor

Case 1: $\alpha_1 > \alpha_2$, $\beta_1 > \beta_2$. Let $a = \alpha_1 - \alpha_2$ and $b = \beta_1 - \beta_2$

$$S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1-\alpha_2} C_B^{\beta_1-\beta_2} \Rightarrow S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{a} C_B^{b}$$

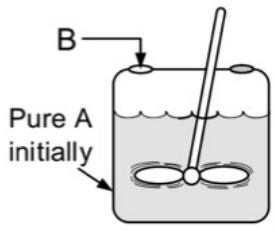

(c) Batch

To maximize the ratio $\frac{r_D}{r_U}$, maintain the concentrations of both A and B as high as possible:
Use: A tubular reactor, A batch reactor, or High pressures (if gas phase), and reduce inerts

عشان نحافظ على تراكيز A, B بأعلى قيمة ممكنة

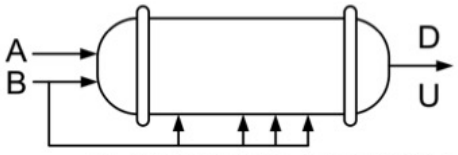
Case 2: $\alpha_1 > \alpha_2$, $\beta_1 < \beta_2$. Let $a = \alpha_1 - \alpha_2$ and $b = \beta_2 - \beta_1$

$$S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1-\alpha_2} C_B^{\beta_1-\beta_2} \Rightarrow S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1 C_A^{a}}{k_2 C_B^{b}}$$



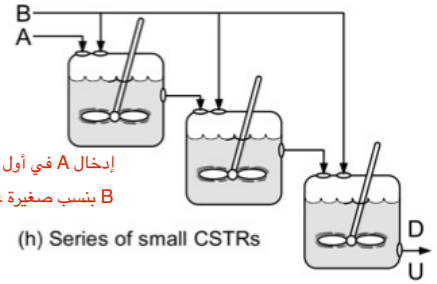
(d) Semibatch

To maximize the ratio $\frac{r_D}{r_U}$, the concentration of A should be high and the concentration of B is low, Use: (وضع A كاملاً بالبداية وإضافة B تدريجياً ببطء).



(f) A membrane reactor or a tubular reactor with side streams

- A semi-batch reactor in which B is fed slowly into a large amount of A
- A membrane reactor or a tubular reactor with side streams of B continually fed to the reactor (إدخال A من البداية وتوزيع B على فتحات جانبية).
- A series of small CSTRs with A fed only to the first reactor and small amounts of B fed to each reactor. In this way, B is mostly consumed before the CSTR exit stream flows into the next reactor

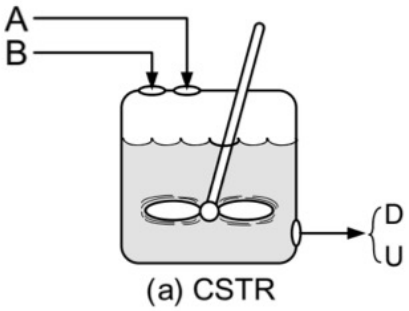


(h) Series of small CSTRs

إدخال A في أول مفاعل وتوزيع إضافة B بنسب صغيرة على باقي المفاعلات.

Case 3: $\alpha_1 < \alpha_2$, $\beta_1 < \beta_2$. Let $a = \alpha_2 - \alpha_1$ and $b = \beta_2 - \beta_1$

$$S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1-\alpha_2} C_B^{\beta_1-\beta_2} \Rightarrow S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2 C_A^a C_B^b}$$



(a) CSTR

The reaction should be carried out at low concentrations of A and of B. Use:

لأن مفاعل CSTR يحدث فيه خلط كامل سريع ويعمل دائماً عند أقل تركيز للمتفاعلات

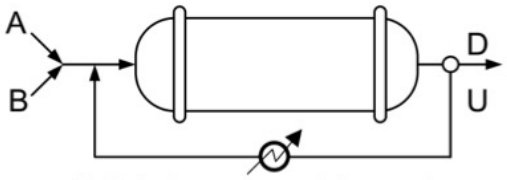
- A CSTR

يُخفض تركيز المواد المتفاعلة عند المدخل عن طريق تخفيفها بالراجع

- A tubular reactor in which there is a large recycle ratio
- A feed diluted with inerts.

إضافة مواد خاملة للتغذية لتخفيف المتفاعلات وتقليل تراكيزها.

- Low pressure (if gas phase).

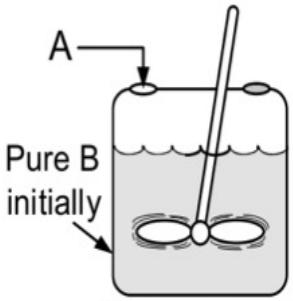


(i) Tubular reactor with recycle

$C = \frac{n}{V}$ low P يعني Volume كبير يعني Concentration قليل

Case 4: $\alpha_1 < \alpha_2$, $\beta_1 > \beta_2$. Let $a = \alpha_2 - \alpha_1$ and $b = \beta_1 - \beta_2$

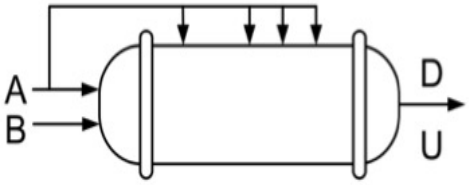
$$S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1-\alpha_2} C_B^{\beta_1-\beta_2} \Rightarrow S_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1 C_B^b}{k_2 C_A^a}$$



(e) Semibatch

To maximize the selectivity, run the reaction at high concentrations of B and low concentrations of A. Use

- A semi-batch reactor with A slowly fed to a large amount of B
- A membrane reactor or a tubular reactor with side streams of A
- A series of small CSTRs with fresh A fed to each reactor.



(g) A membrane reactor or a tubular reactor with side streams

نفس Case 2 بس باختلاف المادة اللي بدي تركيزها عالي

Design of a batch reactor for a series of reactions

The bellow elementary liquid-phase series reaction is carried out in a batch reactor.

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$$

The reaction is heated very rapidly to the reaction temperature, where it is held at this temperature until the time it is quenched.

a) Plot and analyze the concentrations of species A, B, and C as a function of time.
b) Calculate the time to quench the reaction when the concentration of B will be a maximum. الذي يتكون عنده أعلى تركيز ممكن للمادة
c) What are the overall selectivity and yields at this quench time?

(a) 1. Mole Balance on A

$$r_{1A} = -k_1 C_A, \quad \frac{dC_A}{dt} = r_A \quad \Rightarrow \quad \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A$$

Integrating with initial condition $C_A = C_{A0}$ at $t = 0$

$$\ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -k_1 t \quad \Rightarrow \quad C_A = C_{A0} e^{-k_1 t}$$

2. Mole Balance on B $\quad \frac{dC_B}{dt} = r_B$

$$r_{1B} = -r_{1A} = k_1 C_A, \quad r_{2B} = -k_2 C_B \quad \Rightarrow \quad r_B = r_{1B} + r_{2B} \quad \Rightarrow \quad r_B = k_1 C_A - k_2 C_B$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B$$

Rearranging and substituting for $C_A = C_{A0}e^{-k_1 t}$

$$\Rightarrow \quad \frac{dC_B}{dt} + k_2 C_B = k_1 C_{A0} e^{-k_1 t}$$

Using the integrating factor gives:

هاي معادلة تفاضلية خطية من الدرجة الأولى صورتها العامة :

$$\frac{dy}{dt} + P(t)y = Q(t)$$

$$y = C_B$$

$$P(t) = k_2$$

$$Q(t) = k_1 C_{A0} e^{-k_1 t}$$

$$I(t) = e^{\int P(t)dt} = e^{\int k_2 dt} = e^{k_2 t}$$

ضرب طرفي المعادلة التفاضلية في I(t)

$$e^{k_2 t}\left(\frac{dC_B}{dt} + k_2 C_B\right) = e^{k_2 t} \cdot (k_1 C_{A0} e^{-k_1 t})$$

$$\frac{d(C_B e^{k_2 t})}{dt} = k_1 C_{A0} e^{(k_2 - k_1)t}$$

$$\int d(C_B e^{k_2 t}) = \int k_1 C_{A0} e^{(k_2 - k_1)t} dt$$

$$C_B e^{k_2 t} = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} + \text{Constant}$$

At time t = 0, CB = 0:

$$0 \cdot e^0 = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} e^0 + \text{Constant}$$

$$C_B = k_1 C_{A0}\left[\frac{e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}}{k_2 - k_1}\right]$$

3. Mole Balance on C

$$\frac{dC_C}{dt} = r_C$$

Substituting for CB:

$$C_B = k_1 C_{A0}\left[\frac{e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}}{k_2 - k_1}\right]$$

$$r_C = -r_{2B} = k_2 C_B \quad \Rightarrow \quad \frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B$$

$$\frac{dC_C}{dt} = \frac{k_1 k_2 C_{A0}}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right)$$

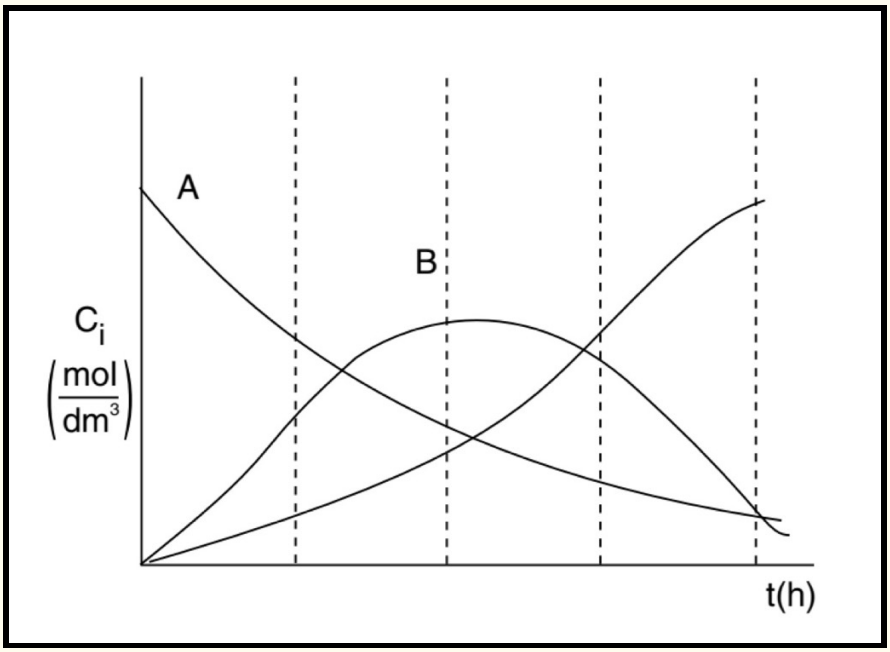
Integrating with Cc = 0 at t = 0:

$$\Rightarrow \quad C_C = \frac{C_{A0}}{k_2 - k_1}\left[k_2(1 - e^{-k_1 t}) - k_1(1 - e^{-k_2 t})\right]$$

$$C_A = C_{A0} e^{-k_1 t}$$

$$C_B = k_1 C_{A0}\left[\frac{e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}}{k_2 - k_1}\right]$$

$$C_C = \frac{C_{A0}}{k_2 - k_1}\left[k_2\left[1 - e^{-k_1 t}\right] - k_1\left[1 - e^{-k_2 t}\right]\right]$$



b

Optimum Yield

$$\frac{dC_B}{dt} = 0 = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1}\left[-k_1 e^{-k_1 t} + k_2 e^{-k_2 t}\right] \quad \Rightarrow \quad t_{\max} = \frac{1}{k_2 - k_1}\ln\frac{k_2}{k_1}$$

$$k_1 e^{-k_1 t} = k_2 e^{-k_2 t} \qquad \frac{e^{-k_1 t}}{e^{-k_2 t}} = \frac{k_2}{k_1} \qquad e^{(k_2 - k_1)t} = \frac{k_2}{k_1} \qquad (k_2 - k_1)t = \ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)$$

$$t_{\max} = \frac{1}{k_2 - k_1}\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)$$

$C_{A0} = 2 \text{ mol/dm}^3$
$k_1 = 0.5 \text{ h}^{-1}$
$k_2 = 0.2 \text{ h}^{-1}$

$$t_{\max} = \frac{1}{0.2 - 0.5}\ln\frac{0.2}{0.5} = \frac{1}{0.3}\ln\frac{0.5}{0.2} \quad \Rightarrow \quad t_{\max} = 3.05 \text{ h}$$

$$C_A = 2\left[\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}\right]\left(\frac{0.5}{0.2}\right)^{\left[\frac{0.5}{0.2-0.5}\right]} = 0.44\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$C_B = 2\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}\frac{(0.5)}{(0.2-0.5)}\left[\left(\frac{0.5}{0.2}\right)^{\left[\frac{0.5}{0.2-0.5}\right]} - \left(\frac{0.5}{0.2}\right)^{\left[\frac{0.2}{0.2-0.5}\right]}\right] = 1.07\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$C_C = C_{A0} - C_A - C_B = 2 - 0.44 - 1.07 = 0.49 \text{ mol/dm}^3$$

C

Selectivity

$$\tilde{S}_{B/C} = \frac{C_B}{C_C} = \frac{1.07}{0.49} = 2.2$$

Yield

$$\tilde{Y}_B = \frac{C_B}{C_{A0} - C_A} = \frac{1.07}{2.0 - 0.44} = 0.69$$

The bellow elementary liquid-phase series reaction is carried out in a batch reactor.

Packed bed reactor

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$$

The reaction is heated very rapidly to the reaction temperature, where it is held at this temperature until the time it is quenched.

a) Plot and analyze the concentrations of species A, B, and C as a function of time.
b) Calculate the time to quench the reaction when the concentration of B will be a maximum.
c) What are the overall selectivity and yields at this quench time?

@ 1. For species A

Design equation: $\frac{dF_A}{dW} = r'_A$

Rate of disappearance of A: $-r'_A = k_1 C_A$

Molar flow rate relation: $F_A = C_A v_0$

$$v_0 \frac{dC_A}{dW} = -k_1 C_A$$

$\frac{df_A}{dw} = r_A$

The space time related to mass of packing:

$$\tau' = \frac{W}{v_0} = \frac{\rho_b V}{v_0} = \rho_b \tau$$

$\frac{d(C_A V)}{dw} = -K_1 C_A$

$\frac{dC_A}{d\tau} = -K_1 C_A$

Integrating with $C_A = C_{A0}$ at $W = 0 \quad \tau' = 0$

$\ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -K_1 \tau$

$$C_A = C_{A0} e^{-k_1 \tau'}$$

$C_A = C_{A0} e^{-K_1 \tau}$

2. For species B

$$\frac{dF_B}{dW} = r'_B$$

$$r'_{\text{net}} = k_1 C_A - k_2 C_B$$

$$F_B = C_B v_0$$

$$v_0 \frac{dC_B}{dW} = k_1 C_A - k_2 C_B$$

$$\frac{dC_B}{d\tau'} + k_2 C_B = k_1 C_{A0} e^{-k_1 \tau'}$$

(Integrating Factor I)

$$C_B = k_1 C_{A0} \left[\frac{e^{-k_1 \tau'} - e^{-k_2 \tau'}}{k_2 - k_1} \right]$$

Maximizing B lead derivation of CB

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

لو كان معطيني ① فرع ← قيم K_1, K_2 كنت طلعت τ

$$\tau'_{\text{opt}} = \frac{1}{k_1 - k_2} \ln \frac{k_1}{k_2}$$

$$W_{\text{opt}} = \frac{v_0}{k_1 - k_2} \ln \frac{k_1}{k_2}$$

$$X_{\text{opt}} = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} = 1 - e^{-k_1 \tau'_{\text{opt}}}$$

$$X_{\text{opt}} = 1 - \exp\left[-\ln \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{\frac{k_1}{k_1 - k_2}} \right] = 1 - \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{\frac{k_1}{k_2 - k_1}}$$

For species C

$$C_C = C_{A0} - C_A - C_B$$

$$C_C = C_{A0} - C_{A0}e^{-k_1\tau'} - \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_1\tau'} - e^{-k_2\tau'}\right)$$

$$C_C = C_{A0}\left[\left(1 - e^{-k_1\tau'}\right) - \frac{k_1}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_1\tau'} - e^{-k_2\tau'}\right)\right]$$

$$C_C = \frac{C_{A0}}{k_2 - k_1}\left[(k_2 - k_1)\left(1 - e^{-k_1\tau'}\right) - k_1\left(e^{-k_1\tau'} - e^{-k_2\tau'}\right)\right]$$

$$C_C = \frac{C_{A0}}{k_2 - k_1}\left[k_2\left(1 - e^{-k_1\tau'}\right) - k_1\left(1 - e^{-k_2\tau'}\right)\right]$$

ⓒ $$\tilde{S}_{B/C} = \frac{C_B}{C_C}$$

نسبة المادة المرغوبة المكونة (B) إلى المادة غير المرغوبة المكونة (C):

عند زمن τ'_{opt}

$$\tilde{S}_{B/C} = \frac{C_{B,\max}}{C_{A0} - C_A - C_{B,\max}}$$

تعرف بنسبة المكون الناتج من B إلى الكمية المستهلكة فعلياً من المادة المتفاعلة A:

$$\tilde{Y}_B = \frac{F_B - F_{B0}}{F_{A0} - F_A} = \frac{C_B}{C_{A0} - C_A} = \frac{C_B}{C_{A0} \cdot X_A}$$

عند زمن τ'_{opt}

$$\tilde{Y}_B = \frac{C_{B,\max}}{C_{A0} - C_{A,\text{opt}}} = \frac{C_{B,\max}}{C_{A0} \cdot X_{\text{opt}}}$$

Example 10.2 Parallel Reactions in a PFR

لو بستخدمها, عادي بس لو سألني كم Q عشان أرفع الحرارة من 150K الى 722K

For the bellow gas-phase reactions that occur in a PFR, Pure A is fed at a rate of 100 mol/s, a temperature of 150 °C, and a concentration of 0.1 mol/dm^3. Determine the molar flow rate profiles down the reactor if it is operated isothermally at 722 K and at 1 bar.

Additional information

$\Delta H_{Rx1A} = -20{,}000$ J/(mol of A reacted in reaction 1)

$\Delta H_{Rx2A} = -60{,}000$ J/(mol of A reacted in reaction 2)

Parallel reaction

تُستخدم عندما تعطينا المعطيات قيمة ثابت السرعة k عند درجة حرارة مرجعية معروفة (T0)

$$k_{1A} = 10 \exp\left[\frac{E_1}{R}\left(\frac{1}{300} - \frac{1}{T}\right)\right] \ s^{-1}$$

first order

$E_1/R = 4000$ K

$E_2/R = 9000$ K

$$k_{2A} = 0.09 \exp\left[\frac{E_2}{R}\left(\frac{1}{300} - \frac{1}{T}\right)\right] \frac{dm^3}{mol \cdot s}$$

Second order

Solution

$$\frac{dF_A}{dV} = -k_1 C_A - k_2 C_A^2 \qquad \frac{dF_B}{dV} = k_1 C_A \qquad \frac{dF_C}{dV} = \frac{1}{2} k_2 C_A^2$$

$$A \rightarrow B$$

$$2A \rightarrow C$$

"Gas phase"

$$C_A = C_{T0}\left(\frac{F_A}{F_T}\right)$$

$$v = v_0 \left(\frac{F_T}{F_{T0}}\right)\left(\frac{P_0}{P}\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

لو بستخدمها

تُستخدم فقط في حالة التفاعل الواحد (Single Reactio

$$F_T = F_A + F_B + F_C$$

$$C_{T0} = \frac{P}{R \cdot T}$$

$$\frac{dF_A}{dV} = -k_1 C_{T0}\left(\frac{F_A}{F_T}\right) - k_2 C_{T0}^2 \left(\frac{F_A}{F_T}\right)^2$$

$$\frac{dF_B}{dV} = k_1 C_{T0}\left(\frac{F_A}{F_T}\right)$$

$$\frac{dF_C}{dV} = \frac{1}{2} k_2 C_{T0}^2 \left(\frac{F_A}{F_T}\right)^2$$

There are 4 unknowns (F_A, F_B, F_C, F_T) with 4 equations that should be solved simultaneously to obtained the desired variables. POLYMATH, MATHEMATICA, MATLAB, Numerical Techniques, etc.. can do the job.

RKF45 ☑ Table ☑ Graph ☑ Report

Differential Equations: 3 | Auxiliary Equations: 8 | ✓ Ready for solution

```
E2_R = 9000
E1_R = 4000
T = 722
d(FC) / d(V) = 0.5*k2*CA^2
FC(0) = 0
d(FB) / d(V) = k1*CA
FB(0) = 0
d(FA) / d(V) = -k1*CA-k2*CA^2
FA(0) = 100
V(0) = 0
V(f) = 100
CA = CTo*(FA/FT)
FT = FA+FB+FC
CTo = 0.1
k2 = 0.09*exp(E2_R*((1/300)-(1/T)))
k1 = 10*exp(E1_R*((1/300)-(1/T)))
```

Calculated values of DEQ variables

	Variable	Initial value	Minimal value	Maximal value	Final value
1	CA	0.1	-4.323E-17	0.1	1.889E-17
2	CTo	0.1	0.1	0.1	0.1
3	E1_R	4000.	4000.	4000.	4000.
4	E2_R	9000.	9000.	9000.	9000.
5	FA	100.	-2.471E-14	100.	1.08E-14
6	FB	0	0	14.33493	14.33493
7	FC	0	0	42.83253	42.83253
8	FT	100.	57.16747	100.	57.16747
9	k1	2.424E+04	2.424E+04	2.424E+04	2.424E+04
10	k2	3.711E+06	3.711E+06	3.711E+06	3.711E+06
11	T	722.	722.	722.	722.
12	V	0	0	100.	100.

Differential equations

1 d(FC)/d(V) = 0.5*k2*CA^2
2 d(FB)/d(V) = k1*CA
3 d(FA)/d(V) = -k1*CA-k2*CA^2

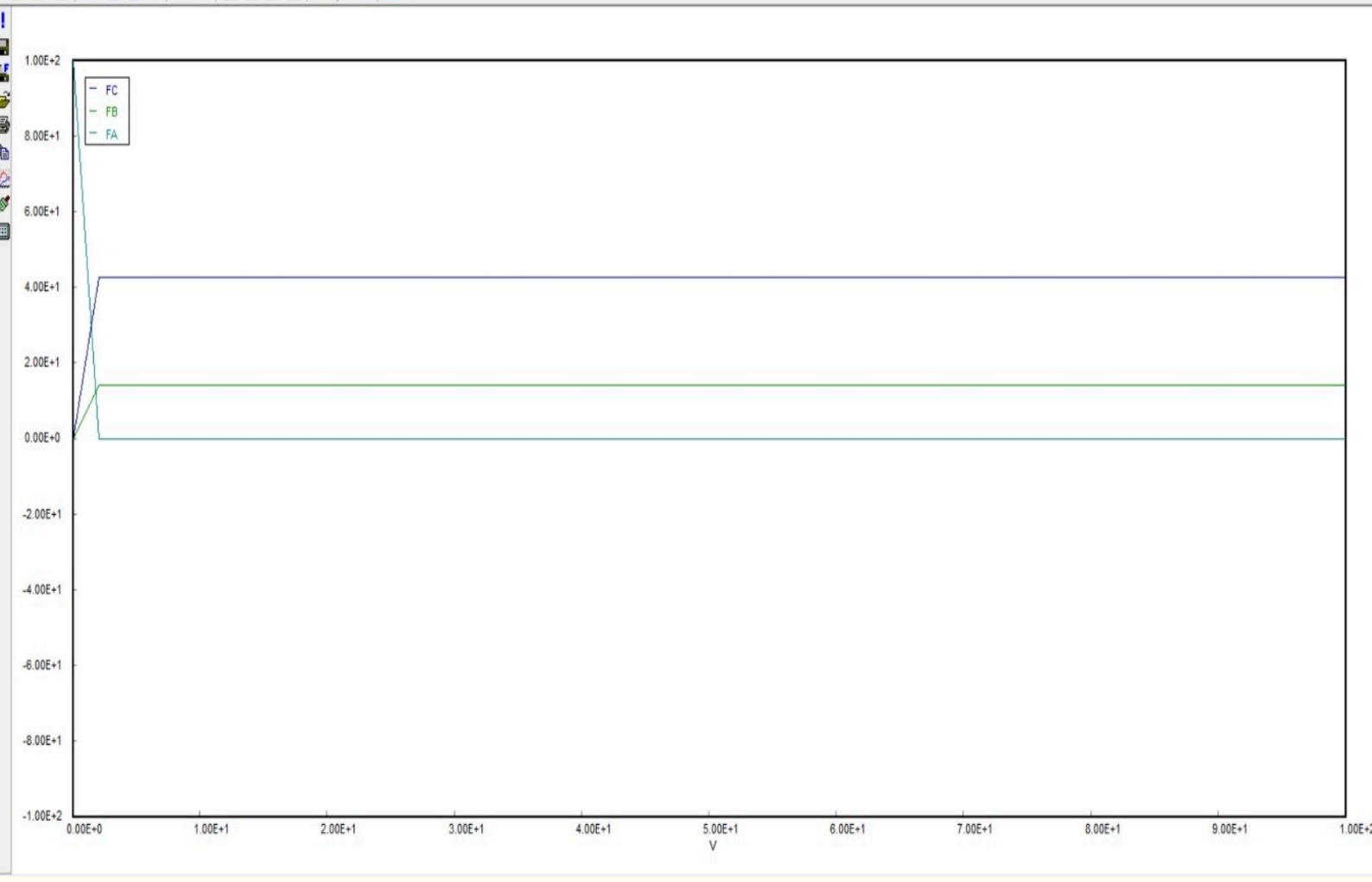
Explicit equations

1 E2_R = 9000
2 E1_R = 4000
3 T = 722
4 CTo = 0.1
5 FT = FA+FB+FC
6 CA = CTo*(FA/FT)
7 k2 = 0.09*exp(E2_R*((1/300)-(1/T)))
8 k1 = 10*exp(E1_R*((1/300)-(1/T)))

General

Total number of equations	11
Number of differential equations	3
Number of explicit equations	8
Elapsed time	0.000 sec
Solution method	RKF_45
Step size guess, h	0.000001

File Options Help





Steady state non isothermal reactor design

Topic 12

"These are the topics we will cover."

1. The energy balance

المعادلة التي منربط فيها التغير في درجات الحرارة مع نسبة التحول

2. Adiabatic operations

تشغيل ال reactor وهو معزول

$$\dot{Q} = 0$$

3. Non-isothermal flow reactors with heat exchange

درجة الحرارة داخل المفاعل تتغيّر باستمرار وما بتظلش ثابته،

لأن تغير درجة الحرارة (T) يؤدي لتغير ثابت سرعة التفاعل (k) حسب معادلة أرهينيوس، وبالتالي تتغير سرعة التفاعل نفسه (Rate of Reaction). لذلك في الأنظمة الـ Non-isothermal لا نكتفي بموازنة المادة (Mole Balance) فقط، بل نربطها بموازنة الطاقة (Energy Balance) لنعرف كيف تتغير الحرارة والتحول معاً.

4. Equilibrium conversion and adiabatic temperature

أقصى نسبة تحول (إنتاج) ممكن نوصلها وشو هي أقصى حرارة حتى أوصلها؟

5. Optimum feed temperature

درجة حرارة ال feed المثالية

معظم التفاعلات في الواقع مش ثابته الحرارة (Non-isothermal).
معادلات ال Design، وقوانين سرعة التفاعل (Rate Laws)، الي درسناهم من قبل برضو رح نطبقهم هون .

Example 12.1:

Calculate the reactor volume necessary for 70% conversion: $A \longrightarrow B$

The reaction is exothermic and the reactor is operated adiabatically. As a result temperature will increase with conversion down the length of the reactor.

هاي الجملة هي الي خلتني اعرف نوع ال reactor (تغيّر الحرارة أو التحول بالنسبة للطول) توجد فقط في(BFR)، عكس مفاعل الـ CSTR الي بتكون الحرارة والتركيز فيه ثابت بكل مكان.

$$V_{PFR} = \int_0^{X_{PFR}} \frac{F_{A0}}{-r_A}\, dX$$

$A \rightarrow B$ First order.

$$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}}$$

التفاعل طارد للحرارة (Exothermic). وحكالي adiabatic يعني معزول ومعنديش تبادل حراري مع الخارج.

هسا اثناء حدوث التفاعل رح يتولد حرارة من التفاعل لأنه Exo، ولأن المفاعل معزول، هاي الحرارة رح تتراكم وتؤدي إلى ارتفاع الحرارة داخل ال reactor

$$-r_A = kC_A$$

وبسبب تغير درجة الحرارة (T)، فإن ثابت سرعة التفاعل k ليس رقماً ثابتاً، بل يتغير حسب (Arrhenius Equation):

$$k = k_1 \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

باقتراض أن التفاعل يحدث (Liquid phase)

$$C_A = C_{A0}(1 - X)$$

$$-r_A = k_1 \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right] C_{A0}(1 - X)$$

$$F_{A0} = C_{A0} v_0$$

$$\frac{dX}{dV} = k_1 \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right] \frac{1 - X}{v_0}$$

بتوصفلي المعادلة التفاضلية كيفية تغير التحول (X) مع حجم المفاعل (V).

ومع هيك، المعادلة فيها متغيرين مجهولين بيتغيرو مع بعض :

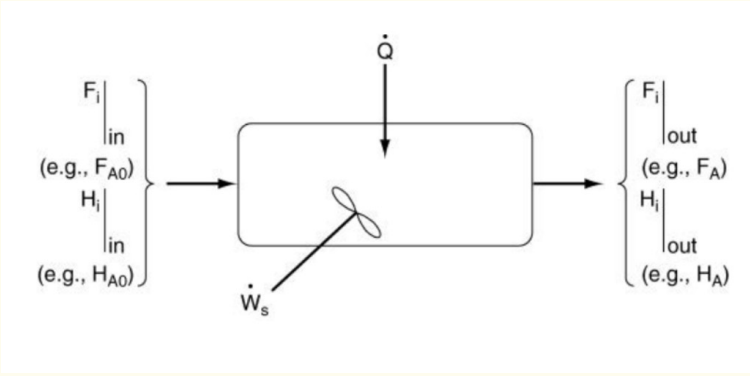
1. conversion ال

2. Temperature

بقدرش احل معادلة واحدة وفيها المتغيرين

عشان هيك بدنا نلجأ لمعادلة (Energy Balance)عشان اربط T بـ X.

Energy Balance



$$\frac{d\widehat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + F_{in} E_{in} - F_{out} E_{out}$$

J/s

F_{in}: molar flow rate — E_{in}: Energy per mole

$$\text{Units} = \left(\frac{\text{mol}}{\text{s}}\right) \times \left(\frac{\text{J}}{\text{mol}}\right) = \frac{\text{J}}{\text{s}} \quad \text{(Watt)}$$

$$\frac{d\widehat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^{n} E_{i,in} F_{i,in} - \sum_{i=1}^{n} E_{i,out} F_{i,out}$$ ← Multi-component

$$\dot{W} = \left(-\sum_{i=1}^{n} F_{i,in} P\tilde{V}_{i,in} + \sum_{i=1}^{n} F_{i,out} P\tilde{V}_{i,out} + \dot{W}_s\right)$$

الشغل نوعين

$$W = P \cdot V$$ Shaft work

$$\text{Rate of Flow Work} = F_i \cdot P \cdot \tilde{V}_i$$ flow work

عند الدخول $-\sum_{i=1}^{n} F_{i,\text{in}} P\tilde{V}_{i,\text{in}}$

المحيط الي برا هو اللي بيعمل الشغل على المادة عشان يدخلها داخل ال reactor

عند الخروج $+\sum_{i=1}^{n} F_{i,\text{out}} P\tilde{V}_{i,\text{out}}$

المادة الناتجة أثناء خروجها من المفاعل هي التي تدفع المحيط عشان تطلع(يعني ال system هو الي بيعمل شغل)، يعني الإشارة موجبة

$(\dot{Q} - \dot{W})$

$\dot{W}$ إشارة السالب الي برا بتعكس الإشارات

$$\sum_{i=1}^{n} F_{i,\text{in}} E_{i,\text{in}} + \sum_{i=1}^{n} F_{i,\text{in}} P\tilde{V}_{i,\text{in}} = \sum_{i=1}^{n} F_{i,\text{in}} (E_{i,\text{in}} + P\tilde{V}_{i,\text{in}})$$

$$E_i \approx U_i$$

$$(E_i + P\tilde{V}_i) \approx (U_i + P\tilde{V}_i)$$

$$H_i = U_i + P\tilde{V}_i$$

الطاقة الكلية تتكون من الطاقة الداخلية U+ طاقة الحركة + طاقة الوضع،بس احنا بنهمل الطاقة الحركية وطاقة الوضع

$$\frac{d\widehat{E}_{\text{sys}}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^{n} F_{i,\text{in}} H_{i,\text{in}} - \sum_{i=1}^{n} F_{i,\text{out}} H_{i,\text{out}}$$

$$A + \frac{b}{a} B \longrightarrow \frac{c}{a} C + \frac{d}{a} D$$

$$\sum_{i=1}^{n} F_{i0} H_{i0} = F_{A0} H_{A0} + F_{B0} H_{B0} + F_{C0} H_{C0} + F_{D0} H_{D0} + F_{I0} H_{I0}$$

$$\sum_{i=1}^{n} F_i H_i = F_A H_A + F_B H_B + F_C H_C + F_D H_D + F_I H_I$$

$$F_A = F_{A0}(1 - X)$$

$$F_B = F_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right)$$

$$F_C = F_{A0}\left(\Theta_C + \frac{c}{a}X\right)$$

$$F_D = F_{A0}\left(\Theta_D + \frac{d}{a}X\right)$$

$$F_I = F_{A0}\Theta_I$$

$$\begin{aligned} F_{A0}H_{A0} - F_AH_A &= F_{A0}H_{A0} - (F_{A0} - F_{A0}X)\cdot H_A \\ &= F_{A0}H_{A0} - F_{A0}H_A + F_{A0}XH_A \\ &= \mathbf{F_{A0}(H_{A0} - H_A) + F_{A0}XH_A} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{B0}H_{B0} - F_BH_B &= (\Theta_BF_{A0})H_{B0} - \left[F_{A0}\left(\Theta_B - \frac{b}{a}X\right)\right]H_B \\ &= \Theta_BF_{A0}H_{B0} - \Theta_BF_{A0}H_B + \frac{b}{a}F_{A0}XH_B \\ &= \mathbf{\Theta_BF_{A0}(H_{B0} - H_B) + \frac{b}{a}F_{A0}XH_B} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{C0}H_{C0} - F_CH_C &= (\Theta_CF_{A0})H_{C0} - \left[F_{A0}\left(\Theta_C + \frac{c}{a}X\right)\right]H_C \\ &= \Theta_CF_{A0}H_{C0} - \Theta_CF_{A0}H_C - \frac{c}{a}F_{A0}XH_C \\ &= \mathbf{\Theta_CF_{A0}(H_{C0} - H_C) - \frac{c}{a}F_{A0}XH_C} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{D0}H_{D0} - F_DH_D &= (\Theta_DF_{A0})H_{D0} - \left[F_{A0}\left(\Theta_D + \frac{d}{a}X\right)\right]H_D \\ &= \Theta_DF_{A0}H_{D0} - \Theta_DF_{A0}H_D - \frac{d}{a}F_{A0}XH_D \\ &= \mathbf{\Theta_DF_{A0}(H_{D0} - H_D) - \frac{d}{a}F_{A0}XH_D} \end{aligned}$$

$$F_{I0}H_{I0} - F_I H_I = (\Theta_I F_{A0})H_{I0} - (\Theta_I F_{A0})H_I$$

$$= \mathbf{\Theta_I F_{A0}(H_{I0} - H_I)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^{n} F_i H_i = [F_{A0}(H_{A0} - H_A) + \Theta_B F_{A0}(H_{B0} - H_B) + \Theta_C F_{A0}(H_{C0} - H_C) + \Theta_D F_{A0}(H_{D0} - H_D) + \Theta_I F_{A0}(H_{I0} - H_I)]$$

$$+ \left[F_{A0}XH_A + \frac{b}{a}F_{A0}XH_B - \frac{c}{a}F_{A0}XH_C - \frac{d}{a}F_{A0}XH_D\right]$$

سحبنا عامل مشترك من الحدّين

$$F_{A0}[(H_{A0} - H_A) + \Theta_B(H_{B0} - H_B) + \Theta_C(H_{C0} - H_C) + \Theta_D(H_{D0} - H_D) + \Theta_I(H_{I0} - H_I)]$$

$$-\left(\frac{d}{a}H_D + \frac{c}{a}H_C - \frac{b}{a}H_B - H_A\right)F_{A0}X$$

$$\sum_{i=1}^{n} F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^{n} F_i H_i = F_{A0}[(H_{A0} - H_A) + (H_{B0} - H_B)\Theta_B + (H_{C0} - H_C)\Theta_C + (H_{D0} - H_D)\Theta_D + (H_{I0} - H_I)\Theta_I] - \left(\frac{d}{a}H_D + \frac{c}{a}H_C - \frac{b}{a}H_B - H_A\right)F_{A0}X$$

$$\Delta H_{\mathrm{Rx}}(T) = \frac{d}{a}H_D(T) + \frac{c}{a}H_C(T) - \frac{b}{a}H_B(T) - H_A(T)$$

$$\sum_{i=1}^{n} F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^{n} F_i H_i = F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i(H_{i0} - H_i) - \Delta H_{\mathrm{Rx}}(T)F_{A0}X$$

$$H_i - H_{i0} = \int_{T_{i0}}^{T} C_{p_i}\,dT$$

$$H_i - H_{i0} = C_{p_i}(T - T_{i0}) \Longrightarrow H_{i0} - H_i = -C_{p_i}(T - T_{i0})$$

$$F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i(H_{i0} - H_i) = -F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T - T_{i0})$$

قيم الـ H° ← Standard table يعني من

$$\Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}(T_R) = \frac{d}{a}H^\circ_D(T_R) + \frac{c}{a}H^\circ_C(T_R) - \frac{b}{a}H^\circ_B(T_R) - H^\circ_A(T_R)$$

reference

(Steady-State)

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^{n} F_{i0}H_{i0} - \sum_{i=1}^{n} F_i H_i = 0$$

$$\Delta C_p = \frac{d}{a}C_{p_D} + \frac{c}{a}C_{p_C} - \frac{b}{a}C_{p_B} - C_{p_A}$$

$$\Delta H_{\mathrm{Rx}}(T) = \Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)$$

$$\mathbf{\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T - T_{i0}) - \left[\Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right]F_{A0}X = 0}$$

$$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T - T_{i0}) - \left[\Delta H^\circ_{Rx}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right] F_{A0}X = 0$$

only for feed → Reactant / Inert

المعادلة العامة

** Energy Balance للـ **

هساهاي المعادلة رح نصير نبسط فيها من خلال الحالات اللي رح نزرلهم

Standard **heats of formation** and standard **integral heats of solution** at infinite dilution (25◦C, 1 atm)

Standard Heats of Formation and Standard Integral Heats of Solution at Infinite Dilution (25°C, 1 atm)

Compound	Formula	State	ΔH_f°, cal/(g · mol)	ΔH_s°, cal/(g · mol)
Ammonia	NH_3	*g*	−11,040	−8,280
		l	−16,060	−3,260
Ammonium nitrate	NH_4NO_3	*s*	−87,270	6,160
Ammonium sulfate	$(NH_4)_2SO_4$	*s*	−281,860	1,480
Calcium carbide	CaC_2	*s*	−15,000	
Calcium carbonate	$CaCO_3$	*s*	−288,450	
Calcium chloride	$CaCl_2$	*s*	−190,000	−19,820
Calcium hydroxide	$Ca(OH)_2$	*s*	−235,800	−3,880
Calcium oxide	CaO	*s*	−151,900	−19,400
Carbon (graphite)	C	*s*	0	
Amorphous, in coke	C	*s*	2,600	
Carbon dioxide	CO_2	*g*	−94,051.8	−4,640
Carbon disulfide	CS_2	*g*	27,550	
		l	21,000	
Carbon monoxide	CO	*g*	−26,416	
Carbon tetrachloride	CCl_4	*g*	−25,500	
		l	−33,340	
Copper sulfate	$CuSO_4$	*s*	−181,000	−17,510
Hydrochloric acid	HCl	*g*	−22,063	−17,960
Hydrogen sulfide	H_2S	*g*	−4,815	−4,580
Iron oxide	Fe_3O_4	*s*	−267,000	
Iron sulfate	$FeSO_4$	*s*	−220,500	−15,500
Nitric acid	HNO_3	*l*	−41,404	−7,968
Potassium chloride	KCl	*s*	−104,175	4,115
Potassium hydroxide	KOH	*s*	−101,780	−13,220
Potassium nitrate	KNO_3	*s*	−117,760	8,350
Potassium sulfate	K_2SO_4	*s*	−342,660	5,680
Sodium carbonate	Na_2CO_3	*s*	−270,300	−5,600
	$Na_2CO_3 \cdot 10H_2O$	*s*	−975,600	16,500
Sodium chloride	NaCl	*s*	−98,232	930
Sodium hydroxide	NaOH	*s*	−101,990	−10,246
Sodium nitrate	$NaNO_3$	*s*	−101,540	−5,111
Sodium sulfate	Na_2SO_4	*s*	−330,900	−560
	$Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$	*s*	−1,033,480	18,850
Sulfur dioxide	SO_2	*g*	−70,960	9,900
Sulfur trioxide	SO_3	*g*	−94,450	−54,130
Sulfuric acid	H_2SO_4	*l*	−193,910	−22,990
Water	H_2O	*g*	−57,798	
		l	−68,317	
Zinc sulfate	$ZnSO_4$	*s*	−233,880	−19,450

Source: F. D. Rossini et al., *Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties*, National Bureau of Standards, Circular 500, 1952.

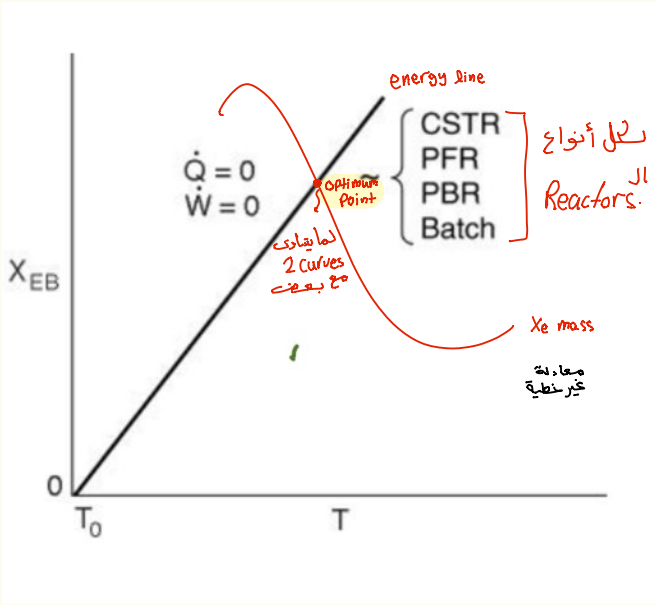
Case① Adiabatic operation $\dot{Q} = 0$ $T_{i0} = T_0$

جميع المواد الداخلة للمفاعل الها نفس درجة الحرارة (T0).

$$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T - T_{i0}) - \left[\Delta H^\circ_{Rx}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right] F_{A0}X = 0$$

Neglect

$$X = \frac{\sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} (T - T_0)}{-\left[\Delta H^{\circ}_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p (T - T_R)\right]}$$



Case ② Variation of temperature with conversion for adiabatic tubular reactor

$$\dot{Q} = 0$$

$$\dot{W}_s = 0$$

$$T_{i0} = T_0$$

$$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0} \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} (T - T_{i0}) - \left[\Delta H^{\circ}_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p (T - T_R)\right] F_{A0} X = 0$$

$$-\sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} T + \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} T_0 - X \Delta H^{\circ}_{\mathrm{Rx}}(T_R) - X \Delta C_p T + X \Delta C_p T_R = 0$$

$$T = \frac{X\left[-\Delta H^{\circ}_{\mathrm{Rx}}(T_R)\right] + \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} T_0 + X \Delta C_p T_R}{\sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} + X \Delta C_p}$$

Case③ CSTR with Heat Exchange

$$\dot{W}_s = 0$$

$$\Delta C_p = 0$$

حرارة التفاعل ثابتة لا تتغير مع الحرارة

$$\Delta H_{Rx}(T) \approx \Delta H^{\circ}_{Rx}$$

نضع مبادل حراري

Heat exchanger / Jacket

$$\dot{Q} = UA(T_a - T)$$

$$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T - T_{i0}) - \left[\Delta H^{\circ}_{Rx}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right] F_{A0}X = 0$$

$\dot{Q} = UA(T_a - T)$

$$X = \frac{\frac{UA}{F_{A0}}(T - T_a) + \sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T - T_0)}{-\Delta H^{\circ}_{Rx}}$$

Case④ batch and Semi batch / unsteady CSTR with Heat Exchange.

1. معادلة الـ Batch:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(r_A V)(\Delta H_{Rx}) - UA(T - T_a)}{\sum_{i=1}^{n} N_i C_{p_i}}$$

هاي الـ Case advanced مشت معنا بـ reaction (1)

2. معادلة الـ Semibatch / Unsteady CSTR:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - \sum_{i=1}^{n} F_{i0} C_{p_i}(T - T_{i0}) + [-\Delta H_{Rx}(T)](-r_A V)}{\sum_{i=1}^{n} N_i C_{p_i}}$$

case ⑤ PFR/PBR with heat exchange

هاي الـ Case advanced

reaction (1) ← معنا بس

$$\frac{dT}{dV}=\frac{Q_g-Q_r}{\sum F_iC_{p_i}}=\frac{(\text{Heat "generated"})-(\text{Heat "removed"})}{\sum F_iC_{p_i}}$$

PFR in terms of conversion

$$\frac{dT}{dV}=\frac{\overbrace{r_A\Delta H_{Rx}(T)}^{Q_g}-\overbrace{Ua(T-T_a)}^{Q_r}}{F_{A0}\left(\sum\Theta_iC_{P_i}+\Delta C_PX\right)}=\frac{Q_g-Q_r}{F_{A0}\left(\sum\Theta_iC_{P_i}+\Delta C_PX\right)}$$

PBR in terms of conversion

$$\frac{dT}{dW}=\frac{r'_A\Delta H_{Rx}(T)-\frac{Ua}{\rho_b}(T-T_a)}{F_{A0}\left(\sum\Theta_iC_{P_i}+\Delta C_PX\right)}$$

W: weight of catalyst

PBR in terms of molar flow rates

$$\frac{dT}{dW}=\frac{r'_A\Delta H_{Rx}(T)-\frac{Ua}{\rho_b}(T-T_a)}{\sum F_iC_{P_i}}$$

PFR in terms of molar flow rates

$$\frac{dT}{dV}=\frac{r_A\Delta H_{Rx}(T)-Ua(T-T_a)}{\sum F_iC_{P_i}}=\frac{Q_g-Q_r}{\sum F_iC_{P_i}}$$

For multiple reactions in a PFR

(q reactions and m species)

$$\frac{dT}{dV}=\frac{\sum_{i=1}^{q}r_{ij}\Delta H_{Rxij}-Ua(T-T_a)}{\sum_{j=1}^{m}F_jC_{P_j}}$$

i = reaction number, j = species

Example 12.2: Heat of reaction

Calculate the heat of reaction (ΔH_{rxn}) for the synthesis of ammonia from hydrogen and nitrogen at 150 °C (T) in kcal/mol of N_2 reacted and also in kJ/mol of H_2 reacted.

$$N_2 + 3H_2 \longrightarrow 2NH_3$$

$$\Delta H_{Rx}(T) = \Delta H^{\circ}_{Rx}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)$$

المطلوب

بحسبها من (table) على حرارة $T_R = 25^{\circ}C$

عبارة عن $(C_p)_{product} - (C_p)_{reactant}$

ΔH° for elemants دائماً تساوي صفر

$$C_{P_{H_2}} = 6.992 \text{ cal/mol } H_2 \cdot K$$

$$C_{P_{N_2}} = 6.984 \text{ cal/mol } N_2 \cdot K$$

$$C_{P_{NH_3}} = 8.92 \text{ cal/mol } NH_3 \cdot K$$

$$\Delta H^{\circ}_{Rx} = 2NH^{\circ}_3(T_R) - N^{\circ}_2(T_R) - 3H^{\circ}_2(T_R)$$

من table

$$2 * -11040\left[\frac{cal}{mol}\right] - 0 - 0 = -22080\left[\frac{cal}{mol}\right]$$

$$\Delta C_P = 2C_{P_{NH_3}} - 3C_{P_{H_2}} - C_{P_{N_2}}$$
$$= 2(8.92) - 3(6.992) - 6.984$$
$$= -10.12 \text{ cal/mol } N_2 \text{ reacted} \cdot K$$

$$\Delta H_{RX} = -22080 - 10.12(150 - 25)$$

$$= -23310 \frac{cal}{mol\ N_2} * 4.184 \frac{J}{cal}$$

$$= -97500 \frac{J}{mol\ N_2}$$

The heat of reaction for H_2 reacted

$$\Delta H_{RX} = \frac{-97500}{3}$$

$$= -32500 \frac{J}{mol\ H_2}$$

Example 12.3: Adiabatic Liquid-Phase reaction in PFR and CSTR

The isomerization of n-butane is an elementary reversible reaction that is carried out *adiabatically* in the liquid phase under high pressure using essentially trace amounts of a liquid catalyst. It gives a specific reaction rate of 31.1 h^{-1} at 360 K. The feed enters the reactor at 330 K.

$$n\text{-}C_4H_{10} \rightleftharpoons i\text{-}C_4H_{10}$$

a. Calculate the PFR volume necessary to process 163 kmol/h at 95% of equilibrium conversion.
b. Plot and analyze *X*, *Xe*, *T*, and $-r_A$ down the length of the reactor.
c. Calculate the CSTR volume for 40% conversion.

$X = 0.95\ X_{equ}$ لازم أطلعها بالأول.

Additional information:

$\Delta H^\circ_{Rx} = -6900$ J/mol n-butane (exothermic), Activation energy = 65.7 kJ/mol

$K_C = 3.03$ at 60°C, $C_{A0} = 9.3$ mol/dm^3 = 9.3 kmol/m^3

Butane	*i*-Pentane
$C_{P_{n\text{-}B}} = 141$ J/mol·K	$C_{P_{i\text{-}P}} = 161$ J/mol·K (for Inert)
$C_{P_{i\text{-}B}} = 141$ J/mol·K = 141 kJ/kmol·K	

feed ← n-C_4H_{10} 0.9
i-pentane 0.1

$F_{A0} = (0.9)(163) = 146.7\ \frac{Kmol}{h}$

$F_{B0} = 16.3\ \frac{Kmol}{h}$

$F_{T0} = 163\ \frac{Kmol}{h}$

$T_0 = 330\ K$

$$A \rightleftharpoons B$$

$v = v_0$ Liquid phase

$$-r_A = k_f C_A - k_b C_B$$

$$-r_A = kC_A - \left(\frac{k}{K_c}\right) C_B$$

$$C_A = C_{A0}(1 - X)$$

$$C_B = C_{A0} X$$

$$-r_A = k\left[C_{A0}(1 - X) - \frac{C_{A0} X}{K_c}\right]$$

$$\boxed{-r_A = kC_{A0}\left[1 - \left(1 + \frac{1}{K_c}\right) X\right]}$$

Energy Balance

$\Delta C_p = (141) - (141) = 0$

$$\dot{Q} - W_s - F_{A0} \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} (T - T_{i0}) - \left[\Delta H^{\circ}_{Rx}(T_R) + \Delta C_p (T - T_R)\right] F_{A0} X = 0$$

only for feed

IgR يعني بس

$\sum \theta_i C_{p_i} = \theta_A C_{p_A} + \theta_I C_{p_I}$

$\theta_A = 1$

$\theta_I = \frac{Y_{I0}}{Y_{A0}} = \frac{0.1}{0.9} = 0.111$

$\sum \theta_i C_{p_i} = C_{p_A} + \theta_I C_{p_I} = 141 + 0.111(161) = 159 \text{ J/mol·K}$

$$T = T_0 + \frac{-\Delta H^{\circ}_{Rx}}{\sum \Theta_i C_{p_i}} X$$

$$T = 330 + \frac{-(-6900)}{159} X \Longrightarrow \mathbf{T = 330 + 43.4X}$$

$$X = \frac{T - 330}{43.4}$$

$$k(T) = 31.1 \exp\left[7906 \left(\frac{T - 360}{360T}\right)\right] \text{ h}^{-1}$$

$$K_c(T) = 3.03 \exp\left[-830.3 \left(\frac{T - 333}{333T}\right)\right]$$

$-r_A = 0$

At equilibrium $\quad -r_A = kC_{A0}\left[1 - \left(1 + \frac{1}{K_c}\right) X_e\right] = 0$ $\quad K, C_{A0} \neq 0$

$$1-\left(1+\frac{1}{K_c}\right)X_e=0$$

$$X=\frac{T-330}{43.4}$$

$$\mathbf{X_e=\frac{K_c}{1+K_c}}$$

هسا شو بدي اعمل بدي أقاطع X الي من ال
energy مع ال X الي جاي من معادلة ال design

Nonlinear equations

1 f(T) = Kc/(1+Kc)-Xe = 0

Explicit equations

1 Kc = 3.03*exp(-830.3*(T-333)/(333*T))

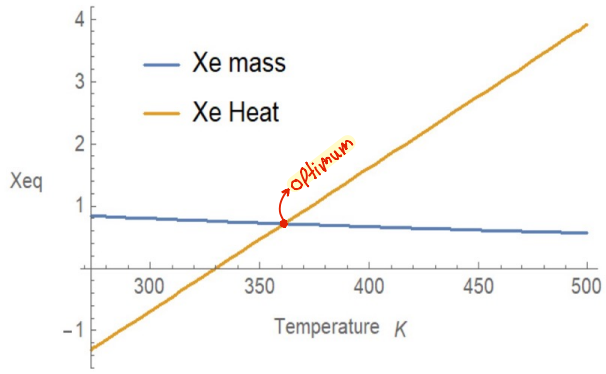
2 Xe = (T-330)/(43.3)

Calculated values of NLE variables

	Variable	Value	f(x)	Initial Guess
1	T	360.923	-3.331E-16	400. (300. < T < 500.)

	Variable	Value
1	Kc	2.498424
2	Xe	0.714157

هاي أكبر X ممكن أحصلها



a. Volume of PFR at 95% of equilibrium conversion

$$X=0.95\,X_e=0.95(0.714)=0.68$$

$$T=330+43.4X \Rightarrow k=31.1\exp\left[7906\left(\frac{T-360}{360T}\right)\right](h^{-1}) \Rightarrow K_C=3.03\exp\left[-830.3\left(\frac{T-333}{333T}\right)\right]$$

$$\Rightarrow -r_A=kC_{A0}\left[1-\left(1+\frac{1}{K_C}\right)X\right]$$

X	T (K)	k (h^{-1})	K_C	X_e	$-r_A$ (kmol/m³·h)	$\frac{F_{A0}}{-r_A}$ (m³)
0	330	4.22	3.1	0.76	39.2	3.74
0.2	338.7	7.76	2.9	0.74	52.8	2.78
0.4	347.3	14.02	2.73	0.73	58.6	2.50
0.6	356.0	24.27	2.57	0.72	37.7	3.88
0.65	358.1	27.74	2.54	0.718	24.5	5.99
0.7	360.3	31.67	2.5	0.715	6.2	23.29

Simpson 3/8 from 0 → 0.6

$$V_1 = \frac{3}{8} h \left[y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3 \right] \qquad h = 0.2$$

$$V_1 = \frac{3}{8}(0.2)\left[3.74 + 3(2.78) + 3(2.50) + 3.88\right]$$

$$V_1 = 0.075 \times \left[3.74 + 8.34 + 7.50 + 3.88\right] = \mathbf{1.75}\ \mathrm{m^3}$$

Simpson 1/3

$$V_2 = \frac{1}{3} h \left[y_0 + 4y_1 + y_2 \right] \qquad h = 0.05$$

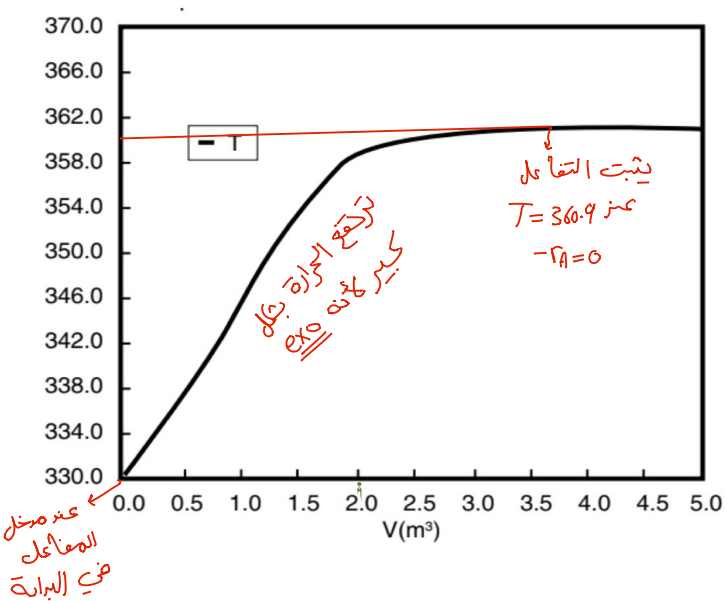
$$V_2 = \frac{1}{3}(0.05)\left[3.88 + 4(5.99) + 23.29\right]$$

$$V_2 = 0.01667 \times \left[3.88 + 23.96 + 23.29\right] = \mathbf{0.85}\ \mathrm{m^3}$$

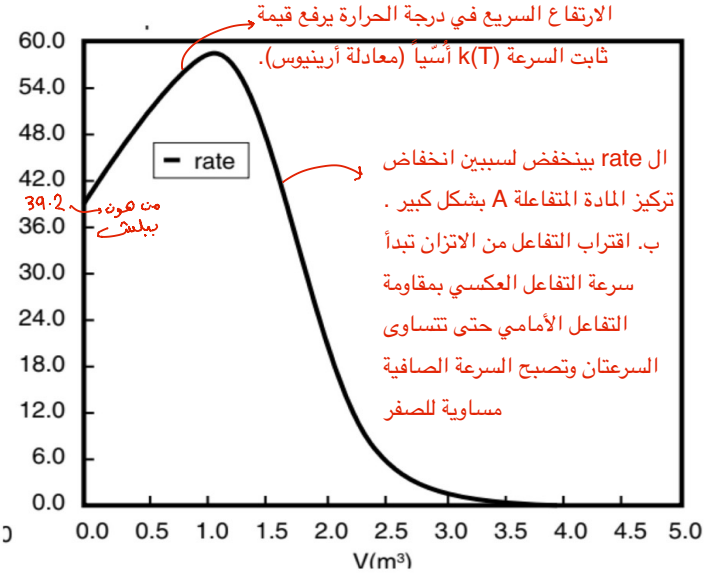
$$V_{\mathrm{PFR}} = V_1 + V_2 = 1.75 + 0.85 = \mathbf{2.60}\ \mathrm{m^3}$$

b

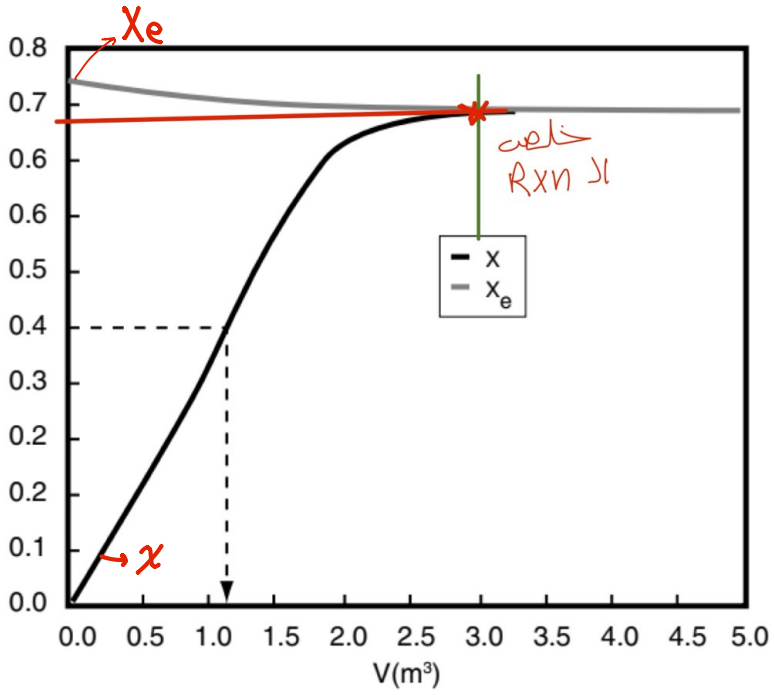
Temperature vs. volume



Rate vs. volume



Conversion and equilibrium conversion vs. reactor volume



تزداد X بتقدم التفاعل واستهلاك المواد ، بينما تقل Xe لأن الحرارة المتولدة من التفاعل الطارد ترتفع فتقلل ثابت الاتزان Kc.



$$T = 330 + 43.4X \Longrightarrow T = 330 + 43.4(0.40) = \mathbf{347.3}\ \text{K}$$

$$k = 31.1 \exp\left[7906\left(\frac{347.3 - 360}{360 \times 347.3}\right)\right] = \mathbf{14.02}\ \text{h}^{-1}$$

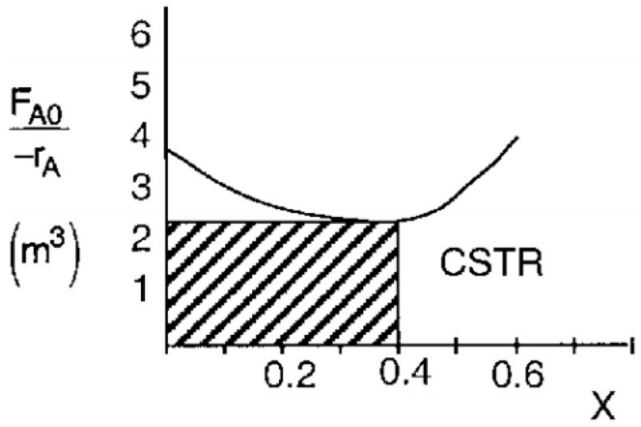
$$K_c = 3.03 \exp\left[-830.3\left(\frac{347.3 - 333}{333 \times 347.3}\right)\right] = \mathbf{2.73}$$

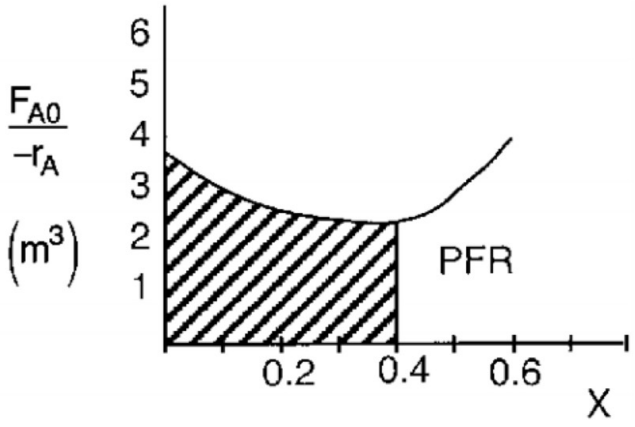
$$-r_A = kC_{A0}\left[1 - \left(1 + \frac{1}{K_c}\right)X\right]$$

$$-r_A = 14.02 \times 9.3\left[1 - \left(1 + \frac{1}{2.73}\right)(0.40)\right] = \mathbf{58.6}\ \text{kmol/m}^3 \cdot \text{h}$$

$$V = \frac{F_{A0} \cdot X}{-r_A} = \frac{146.7 \times 0.40}{58.6} = \mathbf{1.0}\ \text{m}^3$$

Comparison between size of CSTR and PFR for the given rate of isomerization of n-butane



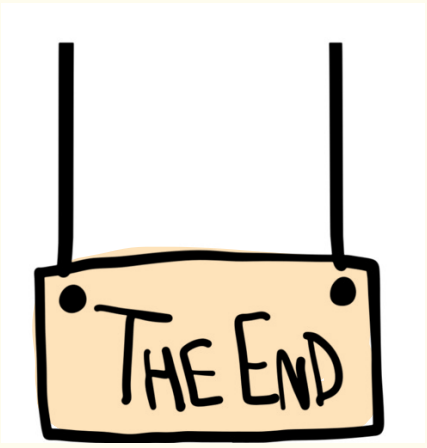


We see that the CSTR volume (1 m^3) to achieve 40% conversion in this adiabatic reaction is less than the PFR volume (1.15 m^3).

هاي من عندي مثلا لو طلب عند X=0.68

عند ال (X = 0.68) بيكون الـ PFR افضل من الـ CSTR لأنه انخفاض سرعة التفاعل لما يقرب ع الاتزان بيخلي حجم الـ CSTR كثير كبير.

فكيف الحل بيكون؟؟ تركيب CSTR أولاً (للوصول إلى X = 0.40 بأقصى سرعة وأقل حجم) بعدين بحط PFR لإكمال التفاعل إلى 0.68.



Adiabatic operation & interstage cooling for non isothermal reactors

Topic 13

1-Adiabatic Operation

2-Interstage Cooling

بدنا نشرح العنوان الي رح ندرسه بما أنه ال reactor عندي شغال adiabatic والتفاعل طارد للحرارة (Exothermic)، يعني الحرارة الناتجة عن التفاعل تتراكم داخل النظام بدون ما اقدر اخلص منها.

طيب شو الي رح يصير ؟؟

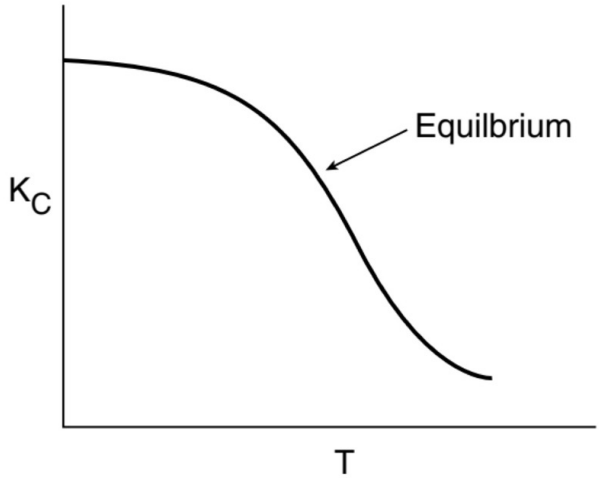
ارتفاع درجة الحرارة داخل المفاعل يؤدي إلى انخفاض ثابت الاتزان (Kc) للتفاعلات ال exothermic .

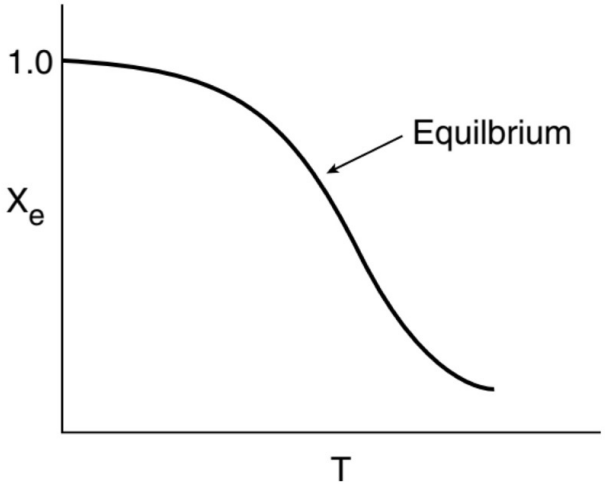
انخفاض Kc بيتسبب في نقصان (X)، ونقصان (Yield)، ونقصان سرعة التفاعل الصافية (-rA).

كيف أتصرف ؟؟

لما يكون عندي مفاعلات (CSTR)

الحل في (Interstage Cooling) بين المراحل.





$$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0} \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} (T - T_{i0}) - \left[\Delta H^\circ_{Rx}(T_R) + \Delta C_p (T - T_R)\right] F_{A0} X = 0$$

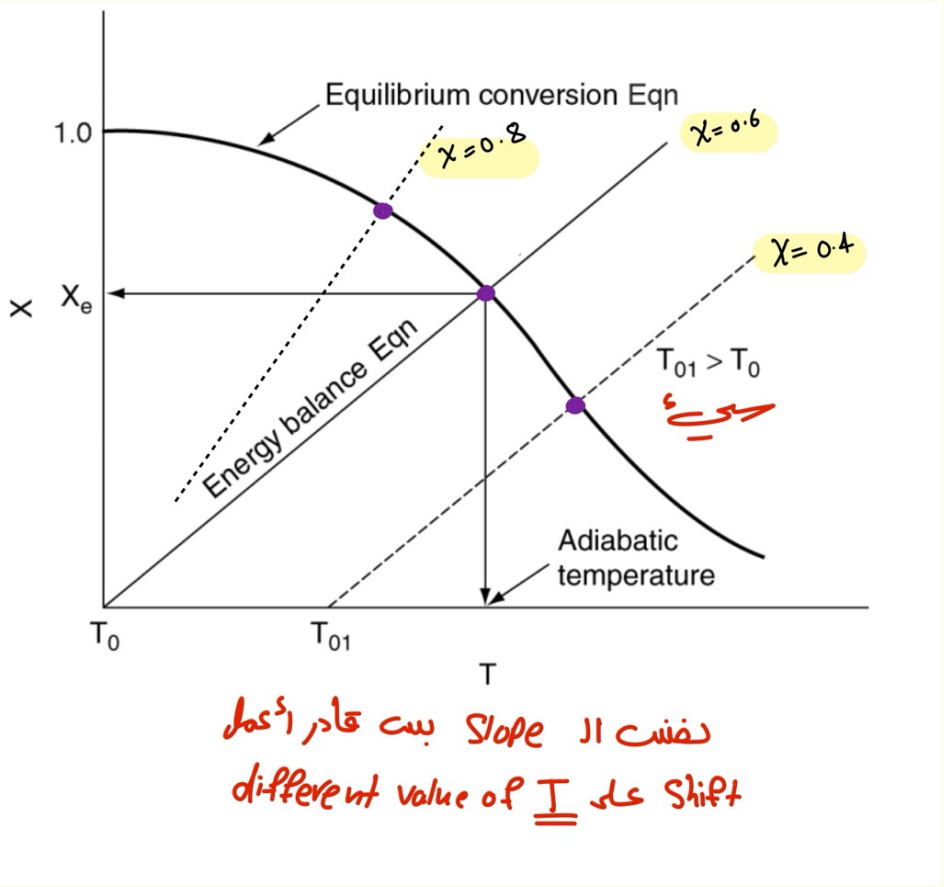
Energy Balance

$$X = \frac{\sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i} (T - T_0)}{-\left[\Delta H^\circ_{Rx}(T_R) + \Delta C_p (T - T_R)\right]}$$

Mass Balance

$$X_e = \frac{K_c}{1 + K_c}$$

$$X_e = \frac{K_c(T_1) \exp\left[\frac{\Delta H^\circ_{Rx}}{R}\left(\frac{1}{T_R} - \frac{1}{T}\right)\right]}{1 + K_c(T_1) \exp\left[\frac{\Delta H^\circ_{Rx}}{R}\left(\frac{1}{T_R} - \frac{1}{T}\right)\right]}$$



هون الفكرة بلعب بحرارة ال feed

الخلاصة بدخلها على حرارة منخفضة لأنه exothermic عشان احصل على اكبر قيمة X بس بالمقابل رح تقللي ال rate عشان قل k ورح احتاج إلى reactor volume اكبر عشان هيك لجأنا إلى cooling interstage نبدأ بحرارة T معقولة عشان التفاعل يكون سريع وبعد هيك بصير ابرد عشان ارفع بقيمة X

طيب كيف بحكي Adiabatic وفي تبريد؟ ال reactor

معزول حرارياً بالكامل، وما بدخلش حرارة ولا بطلع منه أثناء وجود المواد داخل ال reactor.

معناته التبريد وين بيصيرر؟

(Interstage Between Reactors):

التبريد ما بيصيرش أبدا داخل ال reactor أو أثناء التفاعل!

بيكون عندي (External Heat Exchanger) يقع في الأنبوب الواصل بين المفاعل الأول والمفاعل الثاني.

وظيفته يبرد الي طالع من Reactor1 قبل ما يدخل على Reactor 2 ب To منخفضة

Example 13.1: Adiabatic Equilibrium Temperature

For the elementary liquid-phase reaction takes place in an adiabatic CSTR, determine the adiabatic equilibrium temperature and conversion when pure A is fed to the reactor at a temperature of 300 K. What is the CSTR volume necessary to achieve 90% of the adiabatic equilibrium conversion for $v_o = 5\ L/min$?

$$A \rightleftharpoons B$$

Solution

$H_A^\circ(298\ K) = -40{,}000\ cal/mol$ $\quad H_B^\circ(298\ K) = -60{,}000\ cal/mol$

$C_{P_A} = 50\ cal/mol \cdot K$ $\quad C_{P_B} = 50\ cal/mol \cdot K$

$K_e = 100{,}000$ at 298 K, $k = 10^{-3}\exp\left(\frac{E}{R}\left(\frac{1}{298} - \frac{1}{T}\right)\min^{-1}\right)$ with $E = 10{,}000\ \frac{cal}{mol}$

$$C_A = C_{A0}(1 - X_e), \quad C_B = C_{A0}X_e$$

$$K_e(T) = \frac{C_{Be}}{C_{Ae}} = \frac{C_{A0}X_e}{C_{A0}(1 - X_e)} = \frac{X_e}{1 - X_e} \Longrightarrow X_e(T) = \frac{K_e(T)}{1 + K_e(T)}$$

$$K_e(T) = K_e(T_1)\exp\left[\frac{\Delta H^\circ_{Rx}}{R}\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T}\right)\right]$$

$$T_1 = 298\ \text{K}$$

$$K_e(298\ \text{K}) = 100,000$$

$$\Delta H^\circ_{Rx} = -20,000\ \text{cal/mol}$$

$$R = 1.987\ \text{cal/mol}\cdot\text{K}$$

$$K_e(T) = 100,000\exp\left[\frac{-20,000}{1.987}\left(\frac{1}{298}-\frac{1}{T}\right)\right]$$

$$\boxed{K_e(T) = 100,000\exp\left[-33.78\left(\frac{T-298}{T}\right)\right]}$$

$$X_e(T) = \frac{K_e(T)}{1+K_e(T)}$$

$$\boxed{X_e(T) = \frac{100,000\exp\left[-33.78\left(\frac{T-298}{T}\right)\right]}{1+100,000\exp\left[-33.78\left(\frac{T-298}{T}\right)\right]}}$$

$$\mathbf{\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T-T_{i0}) - \left[\Delta H^\circ_{Rx}(T_R) + \Delta C_p(T-T_R)\right]F_{A0}X = 0}$$

$$\boxed{X = \frac{\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{p_i}(T-T_0)}{-\left[\Delta H^\circ_{Rx}(T_R) + \Delta C_p(T-T_R)\right]}}$$

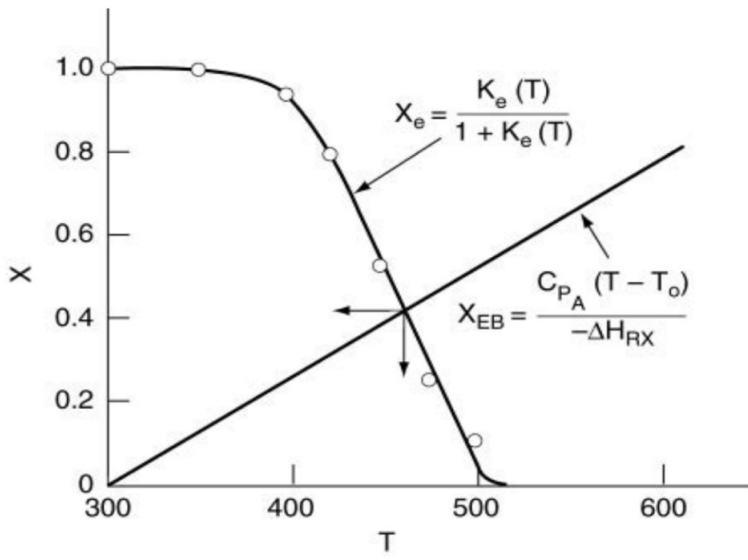
$$\Delta C_P = 0$$

$$T_0 = 300\ \text{K}$$

$$X_{EB} = \frac{C_{P_A}(T-T_0)}{-\Delta H^\circ_{Rx}} = \frac{50(T-300)}{-(-20,000)} = 2.5\times10^{-3}(T-300)$$

Mass Balance (Design equation):

$T(K)$	K_e	X_e	k (min^{-1})
298	100,000.00	1.00	0.001
350	661.60	1.00	0.012
400	18.17	0.95	0.074
425	4.14	0.80	0.153
450	1.11	0.53	0.300
475	0.34	0.25	0.541
500	0.12	0.11	0.919



Energy Balance:

$T(K)$	300	400	500	600
X_{EB}	0	0.25	0.50	0.75

A

The intersection of $X_{EB}(T)$ and $X_e(T)$ gives $X_e = 0.42$ and $T_e = 465$ K.

B

$$X = 0.9 \times X_{e,\text{adiab}} = 0.9 \times 0.42 = 0.38$$

درجة حرارة المفاعل عند X = 0.38

$$X_{EB} = 2.5 \times 10^{-3}(T - 300)$$

$$0.38 = 2.5 \times 10^{-3}(T - 300)$$

$$T = 452 \text{ K}$$

$$k(452 \text{ K}) = 10^{-3} \exp\left[\frac{10,000}{1.987}\left(\frac{1}{298} - \frac{1}{452}\right)\right] \approx 0.322 \text{ min}^{-1}$$

$$K_e(T) = 100,000 \exp\left[-33.78\left(\frac{T - 298}{T}\right)\right]$$

$$K_e(452 \text{ K}) = 100,000 \times 0.00001003 \approx 1.0$$

$$X_e(452\ \text{K}) = \frac{K_e}{1+K_e} = \frac{1.0}{1+1.0} = \frac{1.0}{2.0} = 0.50$$

$$-r_A = k_f C_A - k_b C_B$$

$$-r_A = k_f C_{A0}(1-X) - k_b C_{A0} X$$

$$-r_A = k C_{A0}\left[(1-X) - \frac{k_b}{k_f} X\right]$$

$$-r_A = k C_{A0}\left[(1-X) - \frac{X}{K_e}\right]$$

$$K_e = \frac{X_e}{1-X_e} \Longrightarrow \frac{1}{K_e} = \frac{1-X_e}{X_e}$$

$$-r_A = k C_{A0}\left[(1-X) - X\cdot\left(\frac{1-X_e}{X_e}\right)\right]$$

$$-r_A = k C_{A0}\left[(1-X) - X\left(\frac{1}{X_e} - 1\right)\right]$$

$$-r_A = k C_{A0}\left(1 - \frac{X}{X_e}\right)$$

$$V = \frac{F_{A0}\cdot X}{-r_A} \qquad F_{A0} = v_0 \cdot C_{A0}$$

$$V = \frac{v_0 C_{A0} X}{k C_{A0} \left(1 - \frac{X}{X_e}\right)}$$

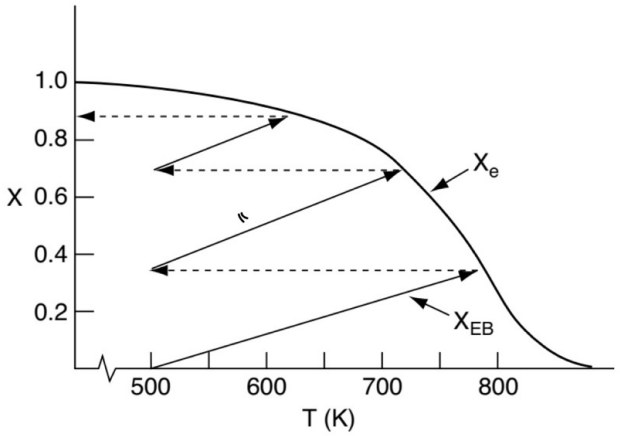
$$V = \frac{v_0 \cdot X}{k \left(1 - \frac{X}{X_e}\right)}$$

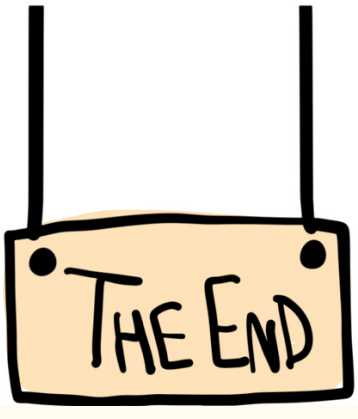
$$V = \frac{(5\ \mathrm{dm^3/min}) \times 0.38}{0.322\ \mathrm{min^{-1}} \times \left(1 - \frac{0.38}{0.50}\right)} = 24.5\ \mathrm{dm^3}\ (\mathrm{L})$$

How to increase conversion for the exothermic reaction? ⇨ Use series CSTRs with interstage cooling



Interstage cooling used for exothermic reversible reactions





Heat transfer in non isothermal reactors

Topic14

1. Design of non-isothermal CSTRs in the presence of external heat exchange.

2. Design of non-isothermal PFRs and the impact of coolant flow direction and pressure drop

هون الي بيختلف عن topic13 انه عندي Q

لما يكون عندي تفاعل (Exothermic) أو (Endothermic)، بتتغير درجة الحرارة داخل المفاعل T. عشان أتحكم بهاي الحرارة من ارتفاعها او نزولها،بلف المفاعل ب (Jacket) بيمر من خلاله مائع ببرد/بيسخن بيدخل بدرجة حرارة Ta1ويخرج بدرجة حرارة Ta2.

※ Heat transfer in non Isothermal CSTR※

عنا طريقتين لحساب قيمة Q

(Overall Energy Balance) $$\dot{Q} = \dot{m}_C C_{pC}(T_{a2} - T_{a1})$$

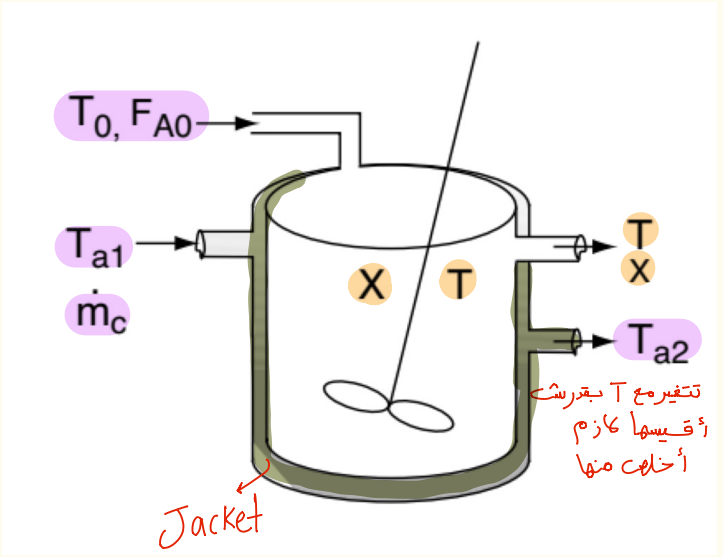
(Incremental Heat Transfer) $$\dot{Q} = UA \cdot \mathrm{LMTD}$$

$$\mathrm{LMTD} = \frac{(T - T_{a1}) - (T - T_{a2})}{\ln\left(\frac{T - T_{a1}}{T - T_{a2}}\right)} = \frac{T_{a2} - T_{a1}}{\ln\left(\frac{T - T_{a1}}{T - T_{a2}}\right)}$$

Feed stream

T_0 درجة الحرارة
وهي بتكون (معروفة).

F_{A0} معدل التدفق المولي للمادة المتفاعلة A



Inside the Reactor

عندي خلط مثالي (Well Mixed).

عشان هيك درجة الحرارة T ونسبة X متساويتان في أي نقطة داخل المفاعل،
وهمه نفسهم اللي بيطلعو مع الخروج (T و X)

Jacket System

مائع تبريد أو تسخين للتحكم بحرارة التفاعل

يدخل بمعدل تدفق $\dot{m}_C$ وبدرجة حرارة T_{a1} ويطلع ب T_{a2}

قيمة معروفة ومحددة T_{a1}

يخرج المائع بدرجة حرارة T_{a2}

add or removed

$$\text{Rate of energy in} - \text{Rate of energy out} - \text{Heat transferred to reactor} = 0$$

$$\dot{m}_c C_{pc}(T_{a1} - T_R) - \dot{m}_c C_{pc}(T_{a2} - T_R) - \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln\left(\frac{T-T_{a1}}{T-T_{a2}}\right)} = 0$$

اذا دخلت السالب على القوس
بتتبسط بهاظ الشكل

$$\dot{m}_c C_{pc}(T_{a1} - T_{a2}) - \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln\left(\frac{T-T_{a1}}{T-T_{a2}}\right)} = 0$$

$$T_{a2} = T - (T - T_{a1}) \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{pc}}\right)$$

هيني بدي أستخلص منها

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{pc} \left\{ (T_{a1} - T) \left[1 - \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{pc}}\right) \right] \right\}$$

لما يكون التدفق تبع التبريد كبير كثير $\dot{m}_c \to \infty$ ، بتصير القيمة داخل الأس صغيرة جداً، فبنستخدم مفكوك تايلور $e^{-x} \approx 1 - x$

$$1 - \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{pc}}\right) \approx 1 - \left(1 - \frac{UA}{\dot{m}_c C_{pc}}\right) = \frac{UA}{\dot{m}_c C_{pc}}$$

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{pc} (T_{a1} - T) \left[\frac{UA}{\dot{m}_c C_{pc}}\right] = UA(T_{a1} - T)$$

زي ما حكيناعندي تدفق عالي بيجعل درجة حرارة ال jacket ثابته تقريباً $T_{a1} \approx T_{a2} = T_a$ تصبح المعادلة بالشكل النهائي:

$$\boxed{\dot{Q} = UA(T_a - T)}$$

$$\dot{\mathbf{Q}} - \dot{\mathbf{W}}_\mathbf{s} - \mathbf{F_{A0}} \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{n}} \mathbf{\Theta_i C_{p_i}(T - T_{i0})} - \left[\mathbf{\Delta H^\circ_{Rx}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)}\right] \mathbf{F_{A0} X} = \mathbf{0}$$

$$UA(T_a - T) - \dot{W}_s - F_{A0} \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{pi}(T - T_{i0}) - \left[\Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right] F_{A0} X = 0$$

$$\left[\Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right] F_{A0} X = UA(T_a - T) - \dot{W}_s - F_{A0} \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{pi}(T - T_{i0})$$

$$X = \frac{UA(T - T_a) + \dot{W}_s + F_{A0} \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{pi}(T - T_{i0})}{-F_{A0}\left[\Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right]}$$

$$\dot{W}_s = 0$$

$$\Delta C_p = 0$$

$$X = \frac{\frac{UA}{F_{A0}}(T - T_a) + \sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{pi}(T - T_{i0})}{-\Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}(T_R)}$$

تبسيط البسط نعوض

في البسط: $\frac{UA}{F_{A0}} = \kappa C_{p0}$

$$\sum \Theta_i C_{pi} = C_{p0}$$

$$\kappa C_{p0}(T - T_a) + C_{p0}(T - T_0) = C_{p0}\left[\kappa(T - T_a) + (T - T_0)\right]$$

$$= C_{p0}\left[\kappa T - \kappa T_a + T - T_0\right]$$

$$= C_{p0}\left[T(1 + \kappa) - (\kappa T_a + T_0)\right]$$

$$= C_{p0}(1 + \kappa)\left[T - \left(\frac{\kappa T_a + T_0}{1 + \kappa}\right)\right]$$

$$\kappa = \frac{UA}{F_{A0} C_{p0}}$$

$$T_c = \frac{\kappa T_a + T_0}{1 + \kappa}$$

Corrected Temperature

تجمع بين حرارة دخول المواد المتفاعلة (T0) وحرارة سترة التبريد (Ta)

$$X = \frac{C_{p0}(1 + \kappa)(T - T_c)}{-\Delta H^\circ_{\mathrm{Rx}}}$$

κ يقيس قدرة ال jacket
على نقل الحرارة (UA)

$\kappa = 0$ يعود المفاعل ليعمل كـ مفاعل
.(Adiabatic CSTR)
كلما كبرت قيمتها يعني صارت قوية
جدا لها قدرة عالية على سحب الحرارة
أو إضافتها

$$T = T_c + \frac{(-\Delta H^{\circ}_{Rx})X}{C_{p0}(1+\kappa)}$$

How to design a non isothermal CSTR

We have 3 cases

معروفة X وبدي T و V

Case (a)

$$T = T_c + \frac{(-\Delta H^{\circ}_{Rx})X}{C_{p0}(1+\kappa)}$$

نعوض X مباشرة في هاي
المعادلة المباشرة لحساب T:

أوجدت T فبحسب ثابت سرعة التفاعل (k):

$$k = Ae^{-E/(RT)}$$

حساب معدل التفاعل $-r_A$

مثلاً لتفاعل من الرتبة الأولى $-r_A = kC_{A0}(1-X)$

حساب حجم المفاعل (V):

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A}$$

Case (b)

معروفة T وبدي X و V

معاي Tبعوضها مباشرة في معادلة موازنة الطاقة لإيجاد XEB

$$X_{EB} = \frac{C_{p0}(1+\kappa)(T-T_c)}{-\Delta H^{\circ}_{Rx}}$$

حساب ثابت سرعة التفاعل (k):

$$k = Ae^{-E/(RT)}$$

حساب معدل التفاعل $-r_A$

حساب حجم المفاعل (V):

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A}$$

Case (c)

معروفة V وبدي X و T

هاي الحالة زنخة عشان x و T بتغيرو بنفس الوقت

رح نلجأ لل Graphical solution

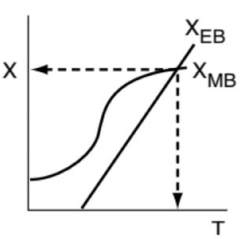
$$X_{EB} = \frac{C_{p0}(1+\kappa)(T-T_c)}{-\Delta H^{\circ}_{Rx}}$$

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A}$$

$$V = \frac{(v_0 C_{A0})X}{kC_{A0}(1-X)}$$

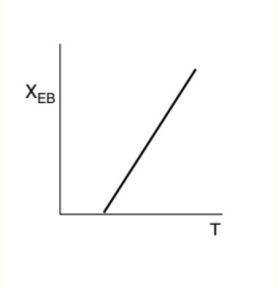
$$\frac{V}{v_0} = \frac{X}{k(1-X)} \Longrightarrow \tau = \frac{X}{k(1-X)}$$

$$X_{MB} = \frac{\tau k}{1+\tau k} = \frac{\tau A e^{-E/(RT)}}{1+\tau A e^{-E/(RT)}}$$



النقطة التي يتقاطع فيها الخط المستقيم مع المنحنى هي هاي نقطة التشغيل!

ننزل بخط عمودي لنقرأ درجة الحرارة (T)، وبخط أفقي على المحور العمودي لنقرأ نسبة (X).



خط مستقيم يرتفع كلما زادت درجة الحرارة T.



A

Specify X
Find V and T

↓

Calculate T

$$T = T_c + \frac{(-\Delta H^\circ_{Rx})(X)}{C_{P_0}(1+\kappa)}$$

↓

Calculate k
$k = Ae^{-E/RT}$

↓

Calculate $-r_A(X,T)$
(e.g., $-r_A = k\,C_{A0}(1-X)$)

↓

Calculate V

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A}$$

B

Specify T
Find X and V

↓

Calculate X_{EB}

$$X_{EB} = \frac{C_{P_0}(1+\kappa)(T-T_c)}{-\Delta H^\circ_{Rx}}$$

↓

Calculate k
$k = Ae^{-E/RT}$

↓

Calculate $-r_A(X,T)$
(e.g., $-r_A = k\,C_{A0}(1-X)$)

↓

Calculate V

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A}$$

C

Specify V
Find X and T

↓

plot X_{EB} vs. T

$$X_{EB} = \frac{C_{P_0}(1+\kappa)(T-T_c)}{-\Delta H^\circ_{Rx}}$$



↓

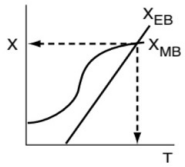
Solve $V = \dfrac{F_{A0}X}{-r_A(X,T)}$
(e.g., for a first-order reaction)

$$X_{MB} = \frac{\tau A \exp[-E/(RT)]}{1+\tau A \exp[-E/(RT)]}$$

↓

Plot X_{EB} and X_{MB} as a function of T on the same figure

↓



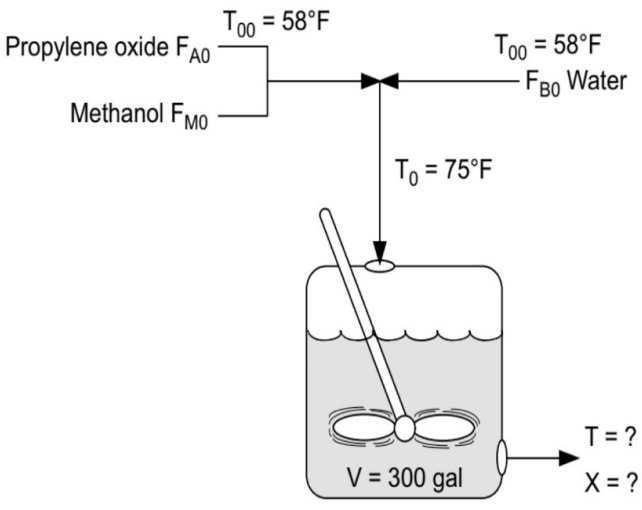
X_{MB} = Conversion calculated from the mole balance

X_{EB} = Conversion calculated from the energy balance

Example 14.1: Production of Propylene Glycol in non-adiabatic CSTR

Propylene glycol is produced by the hydrolysis of propylene oxide according to the below reaction. If a feed of 43.04 lb-mol/h of propylene oxide (46.62 ft^3/h), 71.87 lb-mol/h methanol (46.62 ft^3/h), and 802.8 lb-mol/h water (233.1 ft^3/h) containing 0.1 wt % H2SO4 is fed to a non-isothermal, nonadiabatic CSTR.

The temperature of both feed streams is 58 F prior to mixing, but there is an immediate 17 F temperature rise upon mixing of the two feed streams caused by the heat of mixing. The entering temperature of all feed streams is thus taken to be 75 F.

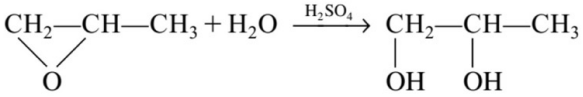


Propylene oxide is a rather low-boiling-point substance. With the mixture you are using, you feel that you cannot exceed an operating temperature of 125 F, or you will lose too much oxide by vaporization through the vent system.

لأن كمية الماء المُضافة كبيرة جداً $C_B \approx C_{B0}$

The reaction is first-order in propylene oxide concentration and apparent zero-order in excess of water with the specific reaction rate

$$k = A\,e^{-E/RT} = 16.96 \times 10^{12}\,(e^{-32{,}400/RT})\ \text{h}^{-1}$$



$$A + B \longrightarrow C$$

The units of E are Btu/lb-mol and T is in °R.

A is propylene oxide ($C_{P_A} = 35$ Btu/lb-mol·°F) [5]

B is water ($C_{P_B} = 18$ Btu/lb-mol·°F)

C is propylene glycol ($C_{P_C} = 46$ Btu/lb-mol·°F)

M is methanol ($C_{P_M} = 19.5$ Btu/lb-mol·°F)

1. Can you use a CSTR as a replacement for the leaking one if it will be operated adiabatically? If so, what will be the conversion of propylene oxide to glycol?

2. If a cooling coil with 40 ft^2 surface is used to remove the excess heat using a large amount of cooling-water flow rate at temperature of 85 °F can be maintained. A typical overall heat-transfer coefficient for such a coil is 100 Btu/h. ft^2.F. Will the reactor satisfy the previous constraint of 125 °F maximum temperature if the cooling coil is used?

شرح وتبسيط للسؤال



تفاعل البروبيلين أوكسايد مع الماء بوجود الميثانول وحامض الكبريتيك ك catalyst .

مادة (Propylene Oxide - المادة المتفاعلة A) هي مادة ذات درجة غليان منخفضة جداً وتتبخر بسرعة عشان هيك ، الشرط الأساسي في المصنع على عدم تجاوز درجة حرارة المفاعل التشغيلية $125°\text{F}$ حتى لا تتطاير المادة وتُفقد.

حرارة المواد القادمة $58°\text{F}$ ، ولكنها ترتفع فوراً بمقدار $17°\text{F}$ عند الخلط بسبب حرارة (Heat of Mixing)، لتصبح حرارة ال feed الفعلية عند المفاعل T0 = 75F

الميثانول يُضاف كمذيب أساسي (Solvent)

H_2SO_4 لا يدخل كمادة متفاعلة ولا كمذيب، بل يتواجد فقط كـ محفّز (Catalyst) لتسريع التفاعل

(Part 1)

السؤال: هل يمكن تشغيل المفاعل (300gal) بشكل adiabatic(معزول حرارياً دون استخدام أي تبريد)؟ وشو هي قيمة نسبة X الناتجة؟

نحسب درجة الحرارة التشغيلية T الناتجة من تقاطع موازنة الطاقة XEB مع موازنة XMB. فإذا كانت $T \leq 125°\text{F}$ يكون المفاعل مناسباً، أمّا إذا تجاوزت هذا الحد فيكون التشغيل مرفوضاً .

(Part 2)

إذاطلع انه التشغيل ال adiabatic

مش ممكن، وقررنا إضافة ملف تبريد (Cooling Coil) داخل المفاعل

بمساحة $A = 40\ \text{ft}^2$ وماء تبريد بدرجة حرارة $T_a = 85^\circ\text{F}$ وبمعامل نقل حرارة كلي $U = 100\ \text{Btu/h} \cdot \text{ft}^2 \cdot^\circ \text{F}$ هل التبريد رح يخلي درجة حرارة المفاعل تحت الحد المسموح 125؟؟؟

البروبيلين أوكسايد (A): $43.04\ \text{lb} - \text{mol/h} \quad 46.62\ \text{ft}^3/\text{h}$

الميثانول (M): $71.87\ \text{lb} - \text{mol/h} \quad 46.62\ \text{ft}^3/\text{h}$

الماء (B): $802.8\ \text{lb} - \text{mol/h} \quad 233.1\ \text{ft}^3/\text{h}$

شرح للفهم كيف كيف حولها

$$\dot{m} = 43.04\ \text{lb} - \text{mol/h} \times 58.08\ \text{lb/lb} - \text{mol} \approx 2500\ \text{lb/h}$$

$$v_{A0} = \frac{\dot{m}}{\rho} = \frac{2500\ \text{lb/h}}{53.62\ \text{lb/ft}^3} = 46.62\ \text{ft}^3/\text{h}$$

$$C_{pA} = 35\ \text{Btu/lb} - \text{mol} \cdot^\circ \text{F}$$

$$C_{pB} = 18\ \text{Btu/lb} - \text{mol} \cdot^\circ \text{F}$$

$$C_{pC} = 46\ \text{Btu/lb} - \text{mol} \cdot^\circ \text{F}$$

$$C_{pM} = 19.5\ \text{Btu/lb} - \text{mol} \cdot^\circ \text{F}$$

$$k = 16.96 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-32,400}{RT}\right)\ \text{h}^{-1}$$

$$V = 300\ \text{gal} = 40.1\ \text{ft}^3$$

$$T_R = 68^\circ\text{F}$$

(Part 1)

$$V = \frac{F_{A0} \cdot X}{-r_A}$$

design equation

you will lose too much oxide by vaporization through the system

Liquid phase

$V = V_0$

$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$

$$-r_A = k \cdot C_A$$

ما عندي C_B لأنه excess فرخلي داخل الثابت k

$$k = 16.96 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-32,400}{R \cdot T}\right)$$

$$-r_A = k \cdot C_{A0}(1 - X)$$

$$V = \frac{(C_{A0} \cdot v_0) \cdot X}{k \cdot C_{A0}(1 - X)}$$

$$\tau = \frac{V}{v_0} = \frac{X}{k(1 - X)}$$

$$X = \frac{\tau k}{1 + \tau k}$$

$$\tau = \frac{V}{v_0} = \frac{40.1\ \text{ft}^3}{326.3\ \text{ft}^3/\text{h}} = 0.123\ \text{h}$$

$$k = 16.96 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-32,400}{R \cdot T}\right)$$

$$\tau k = 2.084 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-16,306}{T}\right)$$

$$X_{MB} = \frac{2.084 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-16,306}{T}\right)}{1 + 2.084 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-16,306}{T}\right)}$$

$$X_{EB} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \Theta_i C_{p_i}(T - T_0)}{-\left[\Delta H^\circ_{\text{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right]}$$

$$T_a = 85^\circ\text{F} + 460 = 545^\circ\text{R}$$

$$T_0 = 535^\circ\text{R}$$

$$T_R = 68^\circ\text{F} + 460 = 528^\circ\text{R} \qquad \Delta H^\circ_{\text{Rx}}(T_R) = -36,000\ \text{Btu/lb} - \text{mol}$$

$$\sum \Theta_i C_{pi} = C_{pA} + \Theta_B C_{pB} + \Theta_M C_{pM}$$ ← only for feed

$$\Theta_A \cdot C_{pA} = 1 \times 35 = 35$$

$$\Theta_B \cdot C_{pB} = 18.65 \times 18 = 335.7$$

$$\Theta_M \cdot C_{pM} = 1.67 \times 19.5 = 32.565$$

$$\sum \Theta_i C_{pi} = 35 + 335.7 + 32.565 = 403.265 \approx 403.3\ \text{Btu/lb} - \text{mol} \cdot^\circ\text{F}$$

$$\Delta C_p = 46 - 18 - 35 = -7\ \text{Btu/lb} - \text{mol} \cdot^\circ\text{F}$$

$$\Delta H_{\text{Rx}}(T) = \Delta H^\circ_{\text{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)$$

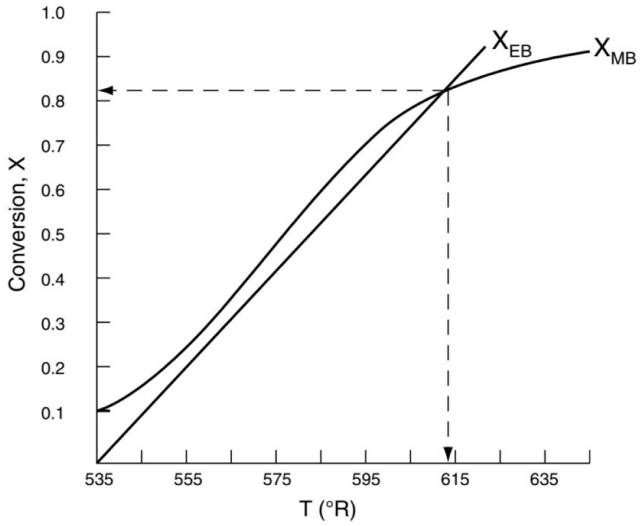
$$\Delta H_{\text{Rx}}(T) = -36,000 - 7(T - 528)$$

$$X_{EB} = \frac{403.3(T - 535)}{36,400 + 7(T - 528)}$$

$$X_{MB} = X_{EB}$$

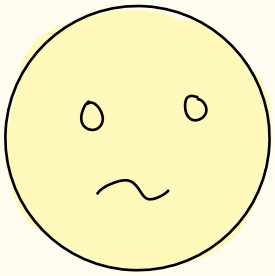
$$\frac{(2.084 \times 10^{12}) \exp\left(\frac{-16,306}{T}\right)}{1 + (2.084 \times 10^{12}) \exp\left(\frac{-16,306}{T}\right)} = \frac{403.3(T - 535)}{36,400 + 7(T - 528)}$$

T (°R)	X_{MB} [Eq. (E12-3.10)]	X_{EB} [Eq. (E12-3.14)]
535	0.108	0.000
550	0.217	0.166
565	0.379	0.330
575	0.500	0.440
585	0.620	0.550
595	0.723	0.656
605	0.800	0.764
615	0.860	0.872
625	0.900	0.980



Intersection point is at 83% conversion and 613 R. At this point, both the energy balance and mole balance are satisfied. Because the temperature must remain below 125 F (585°R), we **cannot** use the 300-gal reactor as it is now

Because $153^\circ\text{F} > 125^\circ\text{F}$ (safety limit), we cannot use the reactor as it is now.



(Part 2)

$$X_{MB} = \frac{2.084 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-16{,}306}{T}\right)}{1 + 2.084 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-16{,}306}{T}\right)}$$

زي ما هي بدون تغيير

$$X_{EB} = \frac{\sum \Theta_i C_{pi}(T - T_0) + \frac{\mathbf{UA}}{\mathbf{F_{A0}}}(\mathbf{T} - \mathbf{T_a})}{-\Delta H_{\mathrm{Rx}}(T)}$$

نضيف حد التبريد

$\frac{UA}{F_{A0}}(T - T_a)$

هاظ هو الفرق عن فرع الأول

$$\frac{UA}{F_{A0}} = 92.9 \text{ Btu/lb} - \text{mol} \cdot^{\circ} \text{F}$$

$$X_{EB} = \frac{403.3(T - 535) + \mathbf{92.9}(\mathbf{T} - \mathbf{545})}{36,400 + 7(T - 528)}$$

$$X_{EB} = \frac{496.2T - 266,396}{36,400 + 7(T - 528)}$$

$$X_{MB} = X_{EB}$$

$$\frac{(2.084 \times 10^{12}) \exp\left(\frac{-16{,}306}{T}\right)}{1 + (2.084 \times 10^{12}) \exp\left(\frac{-16{,}306}{T}\right)} = \frac{496.2T - 266,396}{36,400 + 7(T - 528)}$$

Nonlinear equations

1 f(T) = x-2.084e12*exp(-16306/T)/(1+2.084e12*exp(-16306/T)) = 0

2 f(x) = x-(403.3*(T-535)+92.9*(T-545))/(36400+7*(T-528)) = 0

Calculated values of NLE variables

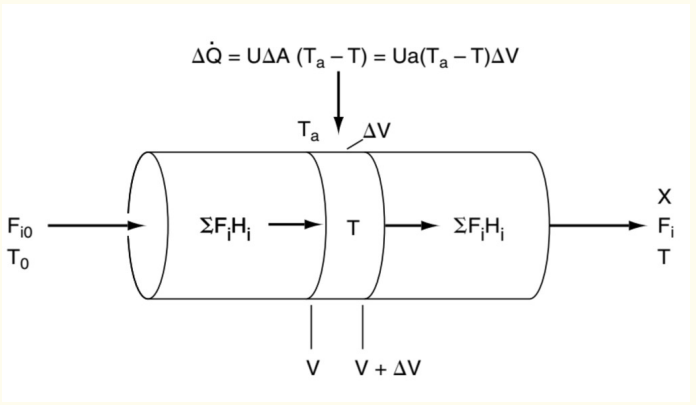
	Variable	Value	f(x)	Initial Guess
1	T	563.6994	-4.519E-08	550.
2	x	0.3632108	1.864E-09	0

$$T = 564°\text{R and } X = 0.36$$

Because $104°\text{F} < 125°\text{F}$ (safety limit), the reactor is now safe and operable after adding the cooling coil.

صح إنه نسبة الـ Conversion بارت B أقل من A، بس الأمان هون أضمن بكثير والمفاعل شغال وأموره تمام. احنا هدفنا هو كيف نجيب أعلى X ممكن بس بنفس الوقت نحافظ على الأمان وما نعديش الحرارة المسموحة

2. Design of non-isothermal PFRs and the impact of coolant flow direction and pressure drop



$$\frac{dF_i}{dV} = r_i = \nu_i(-r_A)$$

$$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0}\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{pi}(T - T_{i0}) - \left[\Delta H^{\circ}_{\text{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right] F_{A0}X = 0$$

معدل الحرارة Q ليس ثابتاً، بل يتغير على طول المفاعل

مشتقة ضرب

الفكرة ببساطة:

1. في مفاعل الـ CSTR:

السائل مخلوط بشكل منيح، ودرجة الحرارة في أي نقطة داخل الخزان هي نفسها عند المخرج. عشان هيك نستخدم معادلة جبرية عادية تحسب المفاعل كاملاً مرة واحدة.

2. في مفاعل الـ PFR:

الحرارة T ونسبة التحول X ليست ثابته داخل المفاعل، بل تتغير باستمرار خطوة بخطوة على طول الأنبوب

عشان هيك هسا رح اشتقها بالنسبة للحجم

$$\frac{d\dot{Q}}{dV} - F_{A0}\left(\sum \Theta_i C_{pi}\right)\frac{dT}{dV} - F_{A0}\left[\Delta H^{\circ}_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right]\frac{dX}{dV} - F_{A0} X \Delta C_p \frac{dT}{dV} = 0$$

سحبت $\frac{dT}{dV}$ عامل مشترك

$$\frac{d\dot{Q}}{dV} - F_{A0}\left(\sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{n}} \mathbf{\Theta_i C_{pi}} + \mathbf{X \Delta C_p}\right)\frac{dT}{dV} - \left[\Delta H^{\circ}_{\mathrm{Rx}}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)\right] F_{A0}\frac{dX}{dV} = 0$$

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A$$

$$\frac{dF_A}{dV} = \frac{d}{dV}[F_{A0} - F_{A0}X]$$

$$\frac{d\dot{Q}}{dV} = Ua(T_a - T)$$

$$\frac{dF_A}{dV} = 0 - F_{A0}\frac{dX}{dV} = -\mathbf{F_{A0}}\frac{\mathbf{dX}}{\mathbf{dV}}$$

$$F_{A0}\frac{dX}{dV} = -r_A$$

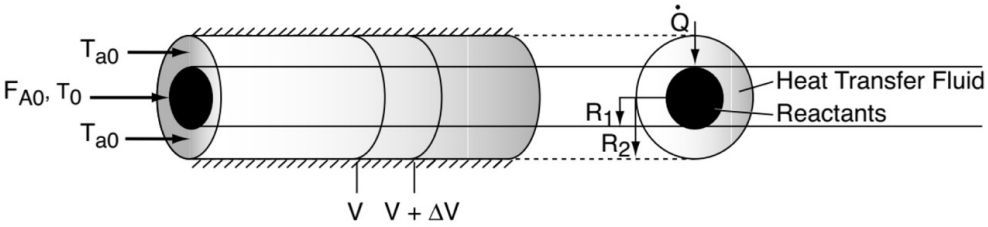
$$\frac{dT}{dV}=\frac{Ua(T_a-T)+\left[-\Delta H^{\circ}_{Rx}(T_R)-\int_{T_R}^{T}\Delta C_p dT\right](-r_A)}{F_{A0}\left(\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{pi}+X\Delta C_p\right)}=f(X,T,T_a)$$

المعادلة تعتمد على متغيرين في درجات الحرارة (T و Ta)، نحتاج إلى
إيجاد علاقة تربط بين Ta و T عشان نحل.
الي هي يا co current او counter

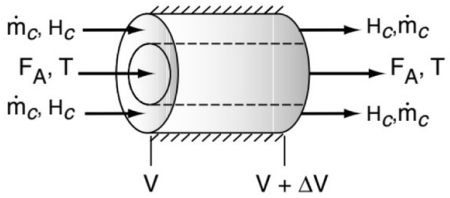
Balance on the Heat-Transfer Fluid

A. Co-current Flow

best choice
When we have
endothermic



$$\left[\begin{matrix}\text{Rate of energy}\\ \text{in at } V\end{matrix}\right]-\left[\begin{matrix}\text{Rate of energy}\\ \text{out at } V+\Delta V\end{matrix}\right]+\left[\begin{matrix}\text{Rate of heat added}\\ \text{by conduction through}\\ \text{the inner wall}\end{matrix}\right]=0$$



$$\dot{m}_c H_c|_V \quad - \quad \dot{m}_c H_c|_{V+\Delta V} \quad + \quad Ua(T-T_a)\Delta V \quad = 0$$

$$-\dot{m}_c\frac{dH_c}{dV}+Ua(T-T_a)=0$$

$$\frac{dH_c}{dV}=C_{P_c}\frac{dT_a}{dV}$$

$$\frac{dT_a}{dV}=\frac{Ua(T-T_a)}{\dot{m}C_p}=f(T,T_a)$$

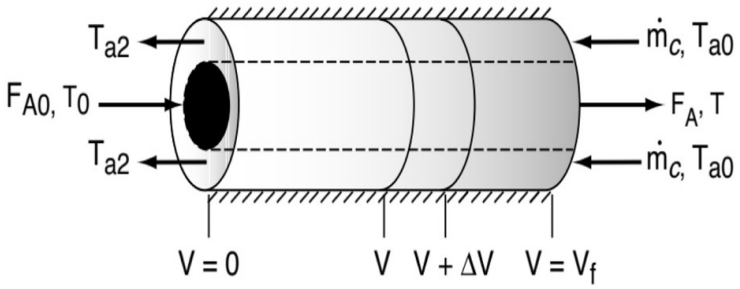
في التفاعلات الطاردة للحرارة، يكون سرعة التفاعل في أعلى مستوياتها عند مدخل المفاعل (لأن تركيز المتفاعلات عالي)، فتتولد كمية حرارة ضخمة جداً في بداية الأنبوب.

B. Counter-current Flow

best choice for
exothermic

Balance on the Heat-Transfer Fluid

ال counter current يحافظ على فرق درجات حرارة مرتفع على طول المفاعل بالكامل



$$\frac{dT_a}{dV}=\frac{Ua(T_a-T)}{\dot{m}C_p}=f(T,T_a)$$

المائع يجري بعكس اتجاه زيادة الحجم V،
فتحصل إشارة سالب تعكس القوس

Mole balance

$$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}} = f(X,T,p)$$

Gas phase

انخفاض الضغط يقلل تراكيز الغازات وسرعة التفاعل (-rA)، فبيصير بدي احل معادلتين:

Pressure drop

$$\frac{dp}{dV} = -h(p,X,T)$$

$$\frac{dP}{dz} = -\underbrace{\frac{G(1-\phi)}{\rho_0 g_c D_P \phi^3}\left[\frac{150(1-\phi)\mu}{D_P} + 1.75G\right]}_{\beta_0}\frac{P_0}{P}\left(\frac{T}{T_0}\right)\frac{F_T}{F_{T0}}$$

$$\frac{F_T}{F_{T0}} = 1 + \varepsilon X$$

Special case: For liquid-phase reactions, the rate is not a function of total pressure, the mole balance is

$$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}} = f(X,T)$$

Design of non-isothermal PFR with heat exchange (conversion approach)

Suppose the following reversible reaction takes place in a plug flow reactor where the pressure drop is negligible. The cooling/heating utility flows co-current with the reaction effluents to the reactor::

$$A + B \rightleftharpoons 2C$$

1. Mole Balance: $\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}}$

2. Rate Law: $-r_A = k_1\left(C_A C_B - \frac{C_C^2}{K_C}\right)$

$$k = k_1(T_1)\exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

$$K_C = K_{C2}(T_2)\exp\left[\frac{\Delta H^\circ_{Rx}}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

$\varepsilon = Zero$

3. Stoichiometry (gas phase, **no** ΔP):

$$C_A = C_{A0}(1-X)\frac{T_0}{T} \qquad C_B = C_{A0}(\Theta_B - X)\frac{T_0}{T} \qquad C_C = 2C_{A0}X\frac{T_0}{T}$$

لأن درجة الحرارة تتغير عبر المفاعل

4. Energy Balances:

$$\text{Reactor:} \quad \frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + (-r_A)(-\Delta H_{Rx})}{F_{A0}[C_{P_A} + \Theta_B C_{P_B} + X\,\Delta C_P]}$$

$$\text{Co-current Coolant:} \quad \frac{dT_a}{dV} = \frac{Ua(T - T_a)}{\dot{m}_c C_{P_c}}$$

Three equations: $\frac{dX}{dV}$, $\frac{dT}{dV}$ and $\frac{dT_a}{dV}$ are varies with the volume, V with three unknowns: X, T and T_a

Design of non-isothermal PFR with heat exchange (molar flowrate approach)

Similar to the reversible reaction takes place in a plug flow reactor where the pressure drop is negligible. The cooling/heating utility flows either co-current or counter-current with the reaction effluents to the reactor::

$$A + B \rightleftharpoons 2C$$

1. Mole Balance: $\frac{dF_A}{dV} = r_A \qquad \frac{dF_B}{dV} = r_B \qquad \frac{dF_C}{dV} = r_C$

2. Rate Law: $-r_A = k_1\left(C_A C_B - \frac{C_C^2}{K_C}\right)$

$$k = k_1(T_1)\exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

$$K_C = K_{C2}(T_2)\exp\left[\frac{\Delta H^\circ_{Rx}}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

3. Stoichiometry (gas phase, **no ΔP**):

$$A + B \rightleftharpoons 2C \qquad r_B = r_A \qquad r_C = -2r_A \qquad -r_A = k_1\left(C_A C_B - \frac{C_C^2}{K_C}\right)$$

$$C_A = C_{T0}\frac{F_A}{F_T}\frac{T_0}{T} \qquad C_B = C_{T0}\frac{F_B}{F_T}\frac{T_0}{T} \qquad C_C = C_{T0}\frac{F_C}{F_T}\frac{T_0}{T}$$

$$F_T = F_A + F_B + F_C$$

4. Energy Balances:

Reactor:
$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + (-r_A)(-\Delta H_{Rx})}{F_A C_{P_A} + F_B C_{P_B} + F_C C_{P_C}}$$

Co-current flow
$$\frac{dT_a}{dV} = \frac{Ua(T - T_a)}{\dot{m}_c C_{P_c}}$$

Countercurrent flow
$$\frac{dT_a}{dV} = \frac{Ua(T_a - T)}{\dot{m}_c C_{P_c}}$$

Five equations: $\frac{dF_A}{dV}$, $\frac{dF_B}{dV}$, $\frac{dF_C}{dV}$, $\frac{dT}{dV}$ and $\frac{dT_a}{dV}$ are varies with the volume, V with five unknowns: F_A, F_B, F_C, T and T_a

Example 14.2: Isomerization of an exothermic reaction of n-butane to i-butane in non-isothermal, non-adiabatic PFR

K_C $\Delta H_{Rx} < 0$

The isomerization of n-butane is an elementary, reversible and exothermic reaction that is carried out in the liquid phase PFR under high pressure using essentially trace amounts of a liquid catalyst. It gives a specific reaction rate of 31.1 h^{-1} at 360 K. The feed enters the reactor at 305 K. The coolant media enters at 315 K with $\dot{m}_c = 500\ kg/h$ and heat capacity of $C_{pc} = 28\ kJ/kg.K$.

$v = v_0$ T_0 T_{a0}

$$n\text{-}C_4H_{10} \rightleftharpoons i\text{-}C_4H_{10}$$

Additional information:

- $\Delta H_{Rx} = -34{,}500$ kJ/kmol
- $Ua = 5{,}000$ kJ/m³·h·K.
- $C_{A0} = 1.86$ kmol/m³
- $F_{A0} = 14.7$ kmol A/h
- Butane
  - $C_{P_{n\text{-}B}} = 141$ J/mol·K
  - $C_{P_{i\text{-}B}} = 141$ J/mol·K = 141 kJ/kmol·K
- *i*-Pentane
  - $C_{P_{i\text{-}P}} = 161$ J/mol·K Inert

$$\frac{E}{R} = \frac{65700}{8.314} \approx 7906$$

$K_C = 3.03$, 333 K

The feed consists of 90% n-butane and 10% i-pentane

Q1

Formulate the system of differential equations $\frac{dX}{dV}, \frac{dT}{dV}, \frac{dT_a}{dV}$ and explicit equations

$$r_A, k, K_C, X_e$$

Q2

Determine the maximum reactor temperature (Tmax) and the reactor volume (V) at which it occurs (Hot Spot).

Q3

Calculate the exit conditions at $V = 5\ m^3$:

Exit conversion (X).

Exit reactor temperature (T).

Exit coolant temperature (Ta).

Q4

Plot temperature profiles (T and Ta) versus reactor volume (V).

Plot conversion profiles (X and Xe) versus reactor volume (V).

Plot reaction rate profile (-rA) versus reactor volume (V).

1

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A$$

$$\frac{dF_A}{dV} = \frac{d}{dV}[F_{A0} - F_{A0}X]$$

$$\frac{dF_A}{dV} = 0 - F_{A0}\frac{dX}{dV} = -\mathbf{F_{A0}}\frac{\mathbf{dX}}{\mathbf{dV}}$$

$$F_{A0}\frac{dX}{dV} = -r_A$$

$$\boxed{\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}}}$$

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + \left[-\Delta H^{\circ}_{\mathrm{Rx}}(T_R) - \int_{T_R}^{T}\Delta C_p dT\right](-r_A)}{F_{A0}\left(\sum_{i=1}^{n}\Theta_i C_{pi} + X\Delta C_p\right)} = f(X, T, T_a)$$

$$\boxed{\frac{dT}{dV} = \frac{(-r_A)(-\Delta H_{\mathrm{Rx}}) - Ua(T - T_a)}{F_{A0}C_{p0}}}$$

$$C_{p0} = C_{pA} + \Theta_I \cdot C_{pI}$$

$$C_{p0} = 141 + (0.1111 \times 161) = 141 + 17.89 = 158.89 \approx 159 \text{ J/mol} \cdot$$

$$\frac{dT_a}{dV} = \frac{Ua(T - T_a)}{\dot{m}_c C_{pc}}$$



Co-current flow

$$-r'_A = k_1 C_A - k_2 C_B$$

$$K_C = \frac{k_1}{k_2} \Longrightarrow k_2 = \frac{k_1}{K_C}$$

$$-r'_A = k\left(C_A - \frac{C_B}{K_C}\right)$$

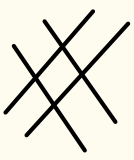
$$C_A = C_{A0}(1 - X)$$

$$C_B = C_{A0}X$$

$$-r'_A = k\left[C_{A0}(1 - X) - \frac{C_{A0}X}{K_C}\right]$$

$$-r'_A = kC_{A0}\left[1 - X - \frac{X}{K_C}\right]$$

$$-r'_A = kC_{A0}\left[1 - \left(1 + \frac{1}{K_C}\right)X\right]$$



$$k = k_1 \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

$$k = 31.1 \exp\left[7906\left(\frac{T-360}{360T}\right)\right]$$

$$K_C = K_{C1} \exp\left[\frac{-\Delta H_{Rx}}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

$$K_C = 3.03 \exp\left[-830.3\left(\frac{T-333}{333T}\right)\right]$$

$$-r'_A = 0$$

$$0 = kC_{A0}\left[1 - \left(1 + \frac{1}{K_C}\right) X_e\right]$$

$$X_e = \frac{K_C}{1 + K_C}$$

Differential equations

1 d(Ta)/d(V) = Ua*(T-Ta)/m/Cpc
2 d(X)/d(V) = -ra/Fa0
3 d(T)/d(V) = ((ra*deltaH)-Ua*(T-Ta))/Cpo/Fa0

Explicit equations

1 Cpc = 28
2 m = 500
3 Ua = 5000
4 Ca0 = 1.86
5 Fa0 = 0.9*163*.1
6 deltaH = -34500
7 k = 31.1*exp((7906)*(T-360)/(T*360))
8 Kc = 3.03*exp((deltaH/8.314)*((T-333)/(T*333)))
9 Xe = Kc/(1+Kc)
10 ra = -k*Ca0*(1-(1+1/Kc)*X)
11 Cpo = 159
12 rate = -ra

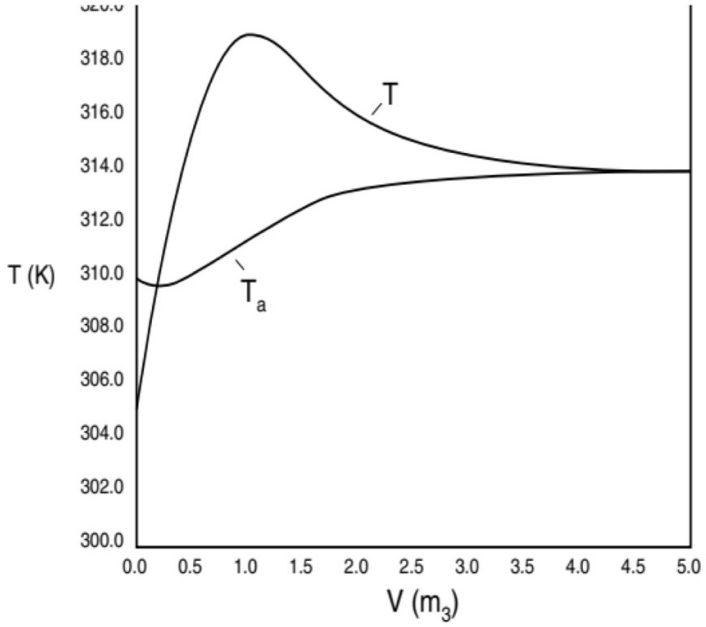
Calculated values of DEQ variables

	Variable	Initial value	Minimal value	Maximal value	Final value
1	Ca0	1.86	1.86	1.86	1.86
2	Cpc	28.	28.	28.	28.
3	Cpo	159.	159.	159.	159.
4	deltaH	-3.45E+04	-3.45E+04	-3.45E+04	-3.45E+04
5	Fa0	14.67	14.67	14.67	14.67
6	k	0.5927441	0.5927441	63.21931	6.80861
7	Kc	9.512006	0.8200563	9.512006	2.641246
8	m	500.	500.	500.	500.
9	ra	-1.102504	-24.31058	-0.1181808	-0.1181808
10	rate	1.102504	0.1181808	24.31058	0.1181808
11	T	305.	305.	372.0171	336.7102
12	Ta	315.	314.5286	335.6949	335.6949
13	Ua	5000.	5000.	5000.	5000.
14	V	0	0	5.	5.
15	X	0	0	0.7185996	0.7185996
16	Xe	0.9048707	0.4505664	0.9048707	0.7253687

عند الحجم 5:بيتساوي تولد الحرارة مع الإزالة من خلال التبريد .

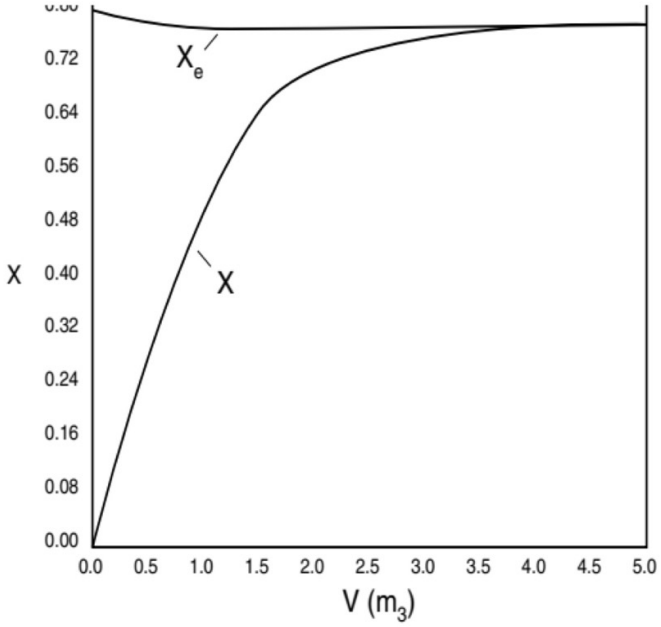
$$(-r'_A)_{372\ \mathrm{K}} \cdot (-\Delta H_{Rx}) = Ua(372 - T_a) \qquad \frac{dT}{dV} = 0$$

Variation of T and X vs V in exothermic, non-isothermal, non-adiabatic isomerization reaction with co-current heat exchange



(a)

حرارة المفاعل (T) ترتفع بسرعة لتوصل القمة ثم تنخفض، بينما حرارة التبريد (Ta) ترتفع ببطء وبشكل مستمر حتى تتساوى الحرارتان تماماً في نهاية المفاعل.

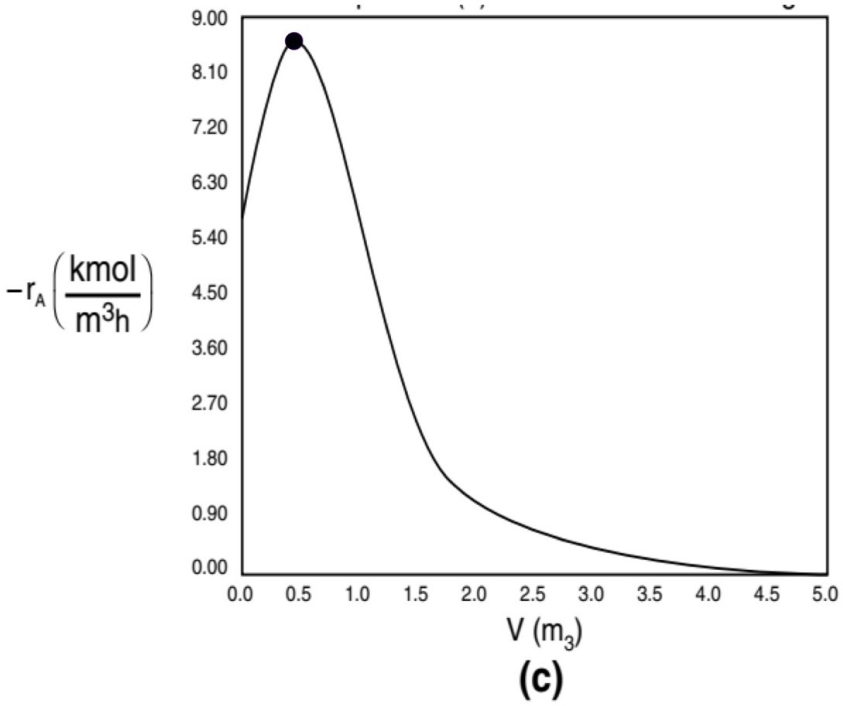


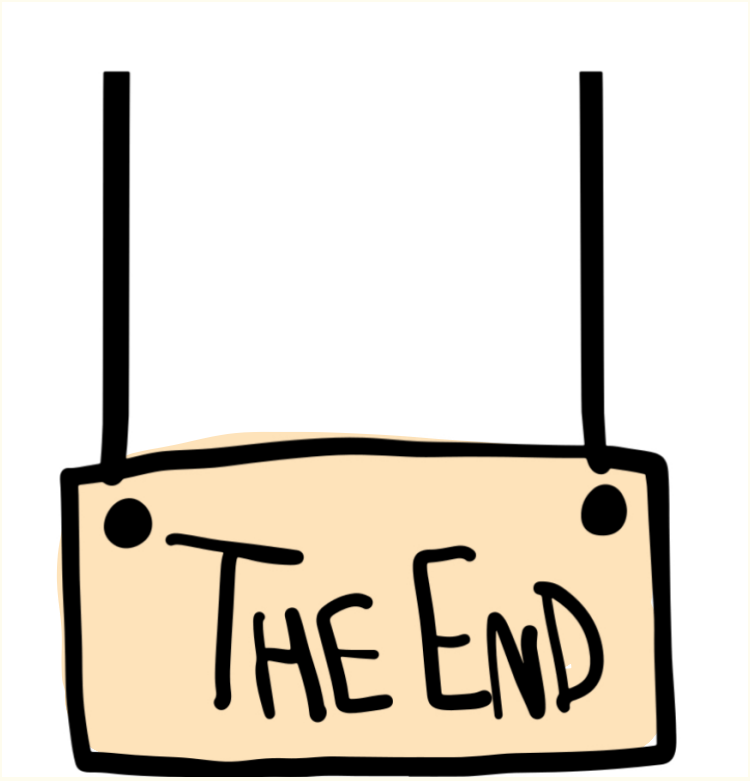
(b)

ارتفاع درجة الحرارة T يقلل من ثابت الاتزان KC. ويقلل قيمة Xe اما قيمة X فتزداد حتى اكبر اشي ممكن توصله هو Xe ما بتتجاوزه .

Effect of reactor volume on rate of isomerization of n-butane in exothermic, non-isothermal, non-adiabatic reaction with co-current heat exchange

لعند 0.5، يكون تأثير الارتفاع السريع في درجة الحرارة (k) هو المسيطر والأقوى من نقص التركيز، فبترتفع السرعة لأعلى بشكل كبير .
بعد 0.5 يتناقص تركيز المتفاعلات بشكل كبير ويقترب التفاعل من الاتزان، فبيصير عامل التركيز هو المتحكم، فبتنزل السرعة بسرعة كبيرة نحو الصفر





Unsteady State,non isothermal reactor design

Topic 15

"These are the topics we will cover."

The Unsteady-State Energy Balance

Energy Balance on Batch Reactors

في حالة (Unsteady-State)،مابتتساوى الطاقة الي داخلة مع الي طالعة، وبالتالي يكون هناك تراكم للطاقة داخل المفاعل يتغير مع الزمن

$\frac{d\hat{E}_{sys}}{dt} \neq 0$ زي ال Batch Reactors

※ The unsteady Energy Balance

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum F_{i0} H_{i0} - \sum F_i H_i = \frac{d\hat{E}_{sys}}{dt}$$

$$\hat{E}_{sys} = \sum N_i E_i \approx \sum N_i U_i$$

$$U_i = H_i - P\tilde{V}_i$$

$$\hat{E}_{sys} = \sum N_i (H_i - P\tilde{V}_i) = \sum N_i H_i - P\sum N_i \tilde{V}_i$$

في الموائع غير القابلة للانضغاط (Incompressible fluid) $P\sum N_i \tilde{V}_i$ صغيراً جداً مقارنة بـ $\sum N_i H_i$ فيتم إهماله

$$\hat{E}_{sys} \approx \sum N_i H_i$$

$$\frac{d\widehat{E}_{sys}}{dt} = \sum N_i \frac{dH_i}{dt} + \sum H_i \frac{dN_i}{dt}$$

$$\boxed{\frac{dH_i}{dt} = C_{p_i} \frac{dT}{dt}} \qquad \boxed{\frac{dN_i}{dt} = -v_i r_A V + F_{i0} - F_i}$$

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum F_{i0}H_{i0} - \sum F_i H_i = \sum N_i C_{pi} \frac{dT}{dt} + \sum H_i \left(-\nu_i r_A V + F_{i0} - F_i\right)$$

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum F_{i0}H_{i0} - \sum \mathbf{F_i H_i} = \sum N_i C_{pi} \frac{dT}{dt} + \sum \nu_i H_i (-r_A V) + \sum F_{i0}H_i - \sum \mathbf{F_i H_i}$$

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum F_{i0}H_{i0} = \sum N_i C_{pi} \frac{dT}{dt} + \sum \nu_i H_i (-r_A V) + \sum F_{i0}H_i$$

$$\boxed{\sum \nu_i H_i = \Delta H_{Rx}}$$

$$\sum N_i C_{pi} \frac{dT}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s - \sum F_{i0}(H_i - H_{i0}) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)$$

$$\boxed{\frac{\mathbf{dT}}{\mathbf{dt}} = \frac{\dot{\mathbf{Q}} - \dot{\mathbf{W}}_\mathbf{s} - \sum \mathbf{F_{i0}}(\mathbf{H_i} - \mathbf{H_{i0}}) + (-\mathbf{\Delta H_{Rx}})(-\mathbf{r_A V})}{\sum \mathbf{N_i C_{pi}}}}$$

هاي المعادلة الأخيرة رح نبسطها حسب الـ Cases

Case1 No phase change

$$H_i - H_{i0} = C_{pi}(T - T_{i0})$$

$$\boxed{\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - \sum F_{i0} C_{pi}(T - T_{i0}) + [-\Delta H_{Rx}(T)](-r_A V)}{\sum N_i C_{pi}}}$$

Case2 (Liquid Phase)

في تفاعلات السوائل، شغل التحريك W
مقارنةً بحرارة التفاعل الكيميائي (negligible)

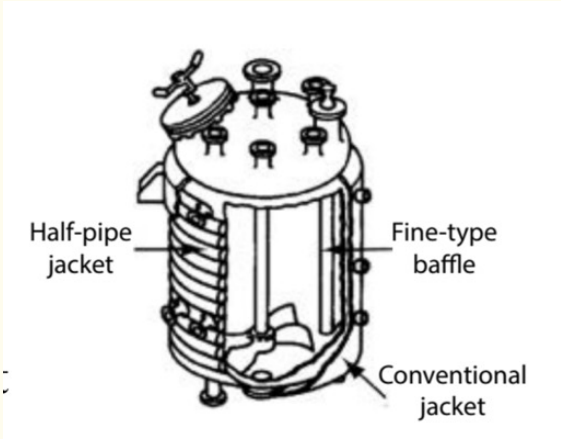
$$\sum N_i C_{pi} \approx N_{A0} C_{ps} \qquad \dot{W}_s = 0$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - F_{A0} C_{ps}(T - T_{i0}) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{N_{A0} C_{ps}}$$

Energy Balance on Batch Reactor

حكينا هو نظام مغلق يعني فش اشي بيدخل وبيخرج أثناء التفاعل

$$F_{i0} = 0$$
$$F_i = 0$$
$$\dot{W}_s = 0$$



$$\frac{d\hat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum N_i C_{P_i}}$$

$$(\dot{Q}_{gb} - \dot{Q}_{rb})$$

$$\dot{Q}_{gb} = (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)$$

$$\dot{Q} = -\dot{Q}_{rb} \quad \dot{Q}_{rb} = \dot{m} C_{P_c}(T - T_{a1}) \left[1 - \exp\left(-\frac{UA}{\dot{m} C_{P_c}}\right)\right]$$

$$\sum N_i C_{P_i}$$

$$\sum N_i C_{P_i} = N_{A0}\left(\sum \Theta_i C_{P_i} + \Delta C_P X\right)$$

$$N_i = N_{A0}(\Theta_i + \nu_i X)$$

$$\Delta C_P = \sum \nu_i C_{P_i}$$

$$T_{a2} = T - (T - T_{a1}) \left[1 - \exp\left(-\frac{UA}{\dot{m} C_{P_c}}\right)\right]$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}_{gb} - \dot{Q}_{rb}}{N_{A0}\left(\sum \Theta_i C_{P_i} + \Delta C_P X\right)}$$

Reminder: The sign convention

Heat **Added**

$\dot{Q} = +10\text{J/s}$

Heat **Removed**

$\dot{Q} = -10\text{J/s}$

Work Done **by** System

$\dot{W}_S = +10\text{J/s}$

Work Done **on** System

$\dot{W}_S = -10\text{J/s}$

Case 1: Adiabatic operation in unsteady batch reactor

$$N_{A0}\frac{dX}{dt} = -r_A V$$ **Design equation**

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum N_i C_{P_i}}$$ **Energy balance**

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H_{Rx})\left(N_{A0}\frac{dX}{dt}\right)}{\sum N_i C_{P_i}}$$

$$dT = \frac{(-\Delta H_{Rx})(N_{A0}dX)}{\sum N_i C_{P_i}}$$

$$N_i = N_{A0}(\Theta_i + \nu_i X)$$

$$\sum N_i C_{P_i} = \sum \left[N_{A0}(\Theta_i + \nu_i X) C_{P_i} \right] = N_{A0} \left(\sum \Theta_i C_{P_i} + X \sum \nu_i C_{P_i} \right)$$

$$\Delta C_P = \sum \nu_i C_{P_i}$$

$$\sum N_i C_{P_i} = N_{A0} \left(\sum \Theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P \right)$$

$$dT = \frac{(-\Delta H_{Rx})(N_{A0} dX)}{N_{A0} \left(\sum \Theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P \right)}$$

$$dT = \frac{(-\Delta H_{Rx}) dX}{\sum \Theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P}$$

$$\int_{T_0}^{T} \left(\sum \Theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P \right) dT = \int_{0}^{X} (-\Delta H_{Rx}) dX$$

$$\left(\sum \Theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P \right) (T - T_0) = [-\Delta H_{Rx}(T_0)] \cdot X$$

$$X = \frac{\sum \Theta_i C_{P_i} (T - T_0)}{-\Delta H_{Rx}(T)}$$

$$T = T_0 + \frac{[-\Delta H_{Rx}(T_0)] X}{\sum \Theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P}$$

Special Case 2: Heat Exchanger in a Batch Reactor

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}_{gb} - \dot{Q}_{rb}}{N_{A0}\left(\sum \Theta_i C_{P_i} + \Delta C_P X\right)}$$

ΔC_P Neglecting

$$\Delta C_P \approx 0$$

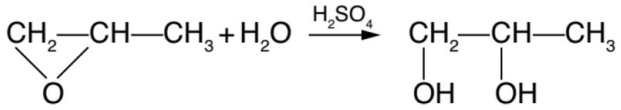
$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}_g - \dot{Q}_r}{N_{A0} C_{P_s}}$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{-r_A V}{N_{A0}}$$

$$\dot{Q}_r = \dot{m}_c C_{P_c} \left\{ (T - T_{a1}) \left[1 - \exp\left(-\frac{UA}{\dot{m}_c C_{P_c}} \right) \right] \right\}$$

Example 15.1 Unsteady state batch reactor with heat exchange → case 2

Suppose a batch reactor is used for the production of propylene glycol from hydrolysis of propylene oxide according



$$A + B \longrightarrow C$$

The reactor is charged with 4 L of ethylene oxide, 4 L of methanol, and 10 L of water containing 0.1 wt % H_2SO_4. The concentration of pure ethylene oxide and methanol are 13.7 mol/L and 24.7 mol/L respectively. The initial temperature of all materials after mixing is 286 K (13˚C).

If the reactor temperature increases above 350 K (77˚C), a secondary, more exothermic reaction will take over, causing runaway and subsequent explosion. The coolant enters at 290 K (17˚C) and the flow rate through the exchanger is 10 g/s.

T_{a1}

$\dot{m}_c$

$\Delta H_{Rx} = -20{,}202$ cal/mol, $C_{P_A} = 35$ cal/mol/K, $C_{P_B} = 18$ cal/mol/K, $C_{P_C} = 46$ cal/mol/K, and $C_{P_M} = 19.5$ cal/mol/K.

$\frac{E}{R} = 9059$ K

$k(297\text{ K}) = 2.73 \times 10^{-4}$

إذا ارتفعت حرارة المفاعل وتجاوزت350k رح يصير في تفاعل ثانوي طارد للحرارة بشدة مما يسبب الانفجار.
أنا هدفي التأكد من انه التبريد قادر يخليلي درجة حرارة المفاعل طوال فترة التفاعل تحت 350k

$$N_{A0} = C_{A,\text{pure}} \times V_A = 13.7\text{ mol/L} \times 4\text{ L} = 54.8\text{ mol}$$

$$N_{B0} = C_{B,\text{pure}} \times V_B = 55.5\text{ mol/L} \times 10\text{ L} = 555\text{ mol}$$

$$N_{M0} = C_{M,\text{pure}} \times V_M = 24.7\text{ mol/L} \times 4\text{ L} = 98.8\text{ mol}$$

$$\Theta_B = \frac{N_{B0}}{N_{A0}} = \frac{555}{54.8} = 10.128$$

شرح كيف طلعنا تركيز المي

$$C_{B,\text{pure}} = \frac{\text{Density}}{\text{Molar Mass}} = \frac{1000\text{ g/L}}{18\text{ g/mol}} = 55.55 \approx 55.5\text{ mol/L}$$

$$\Theta_M = \frac{N_{M0}}{N_{A0}} = \frac{98.8}{54.8} = 1.803$$

$$C_{P_s} = \sum \Theta_i C_{P_i} = C_{P_A} + \Theta_B C_{P_B} + \Theta_M C_{P_M}$$

$$C_{P_s} = 35 + \left(\frac{555}{54.8}\right)(18) + \left(\frac{98.8}{54.8}\right)(19.5) = 35 + 182.3 + 35.2 = 252.5 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$$

$$-r_A = kC_A$$

$$C_A = \frac{N_A}{V} = \frac{N_{A0}(1-X)}{V}$$

$$-r_A = k\left(\frac{N_{A0}(1-X)}{V}\right)$$

$$-r_A V = kN_{A0}(1-X)$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{-r_A V}{N_{A0}}$$

$$\frac{dX}{dt} = k(1-X)$$

$$k(T) = k(T_1) \cdot \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

$$k = 2.73 \times 10^{-4} \exp\left[9059\left(\frac{1}{297} - \frac{1}{T}\right)\right] \ \mathrm{s}^{-1}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q}_g - \dot{Q}_r}{N_{A0} C_{P_s}}$$

$$\dot{Q}_{gb} = (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)$$

$$\dot{Q}_g = N_{A0} \cdot k(1 - X) \cdot (-\Delta H_{Rx})$$

$$\dot{Q}_r = \dot{m}_c C_{P_c}(T - T_{a1}) \left[1 - \exp\left(-\frac{UA}{\dot{m}_c C_{P_c}}\right)\right]$$

Differential equations

1 d(T)/d(t) = (Qg-Qr)/Cps/Nao
2 d(X)/d(t) = k*(1-X)

Explicit equations

1 UA = 10
2 DeltaH = -20202
3 Ta1 = 290
4 Cpc = 4.18
5 Cps = 252.5
6 mc = 10
7 k = .000273*exp(9059*(1/297-1/T))
8 Ta2 = T-(T-Ta1)*exp(-UA/mc/Cpc)
9 Qr = mc*Cpc*(T-Ta1)*(1-exp(-UA/mc/Cpc))
10 Nao = 54.8
11 Qg = Nao* k*(1-X)*(-DeltaH)
12 DeltaQ = Qr-Qg

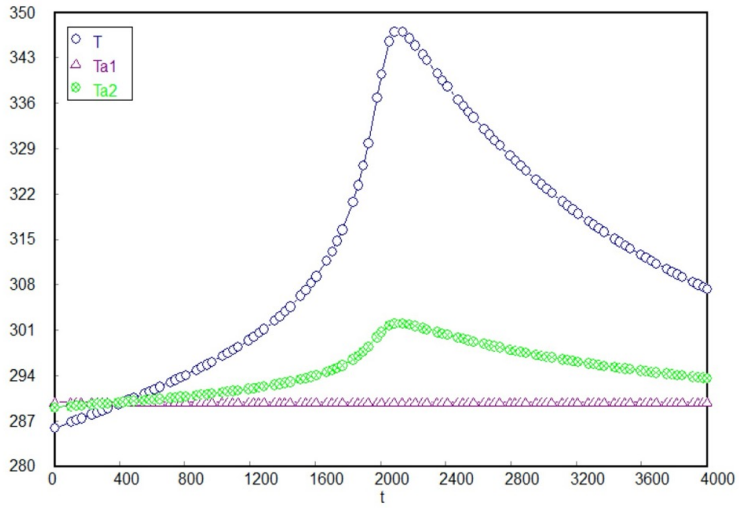
Calculated values of DEQ variables

	Variable	Initial value	Minimal value	Maximal value	Final value
1	Cpc	4.18	4.18	4.18	4.18
2	Cps	252.5	252.5	252.5	252.5
3	DeltaH	-2.02E+04	-2.02E+04	-2.02E+04	-2.02E+04
4	DeltaQ	-129.0831	-1911.68	458.3634	155.5053
5	k	8.446E-05	8.446E-05	0.0224452	0.0007724
6	mc	10.	10.	10.	10.
7	Nao	54.8	54.8	54.8	54.8
8	Qg	93.50797	0.0004292	2329.262	0.0004292
9	Qr	-35.57509	-35.57509	508.6372	155.5058
10	T	286.	286.	347.1903	307.4848
11	t	0	0	4000.	4000.
12	Ta1	290.	290.	290.	290.
13	Ta2	289.1489	289.1489	302.1684	293.7202
14	UA	10.	10.	10.	10.
15	X	0	0	0.9999995	0.9999995

اه عادي يوصل واحد لأن تفاعلنا غير عكسي، فإن الارتفاع الحراري لم يقلل من نسبة التحول، بل سرع من الوصول إلى X =1

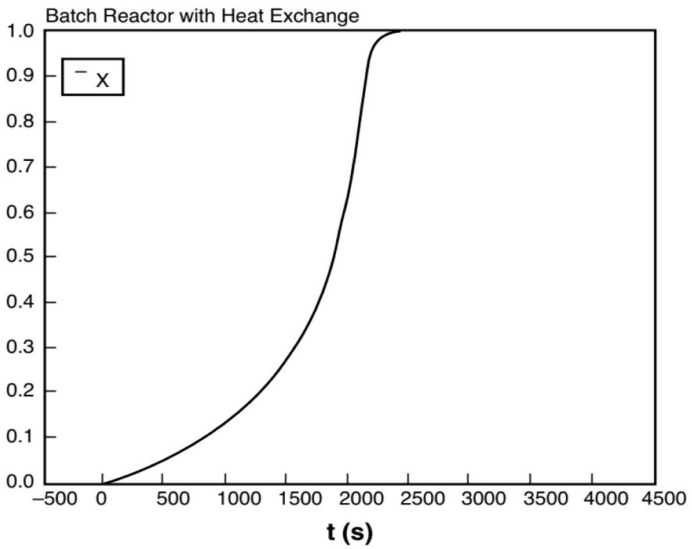
$$T_{max} < 350\ K$$

فإن تصميم المبادل الحراري آمن

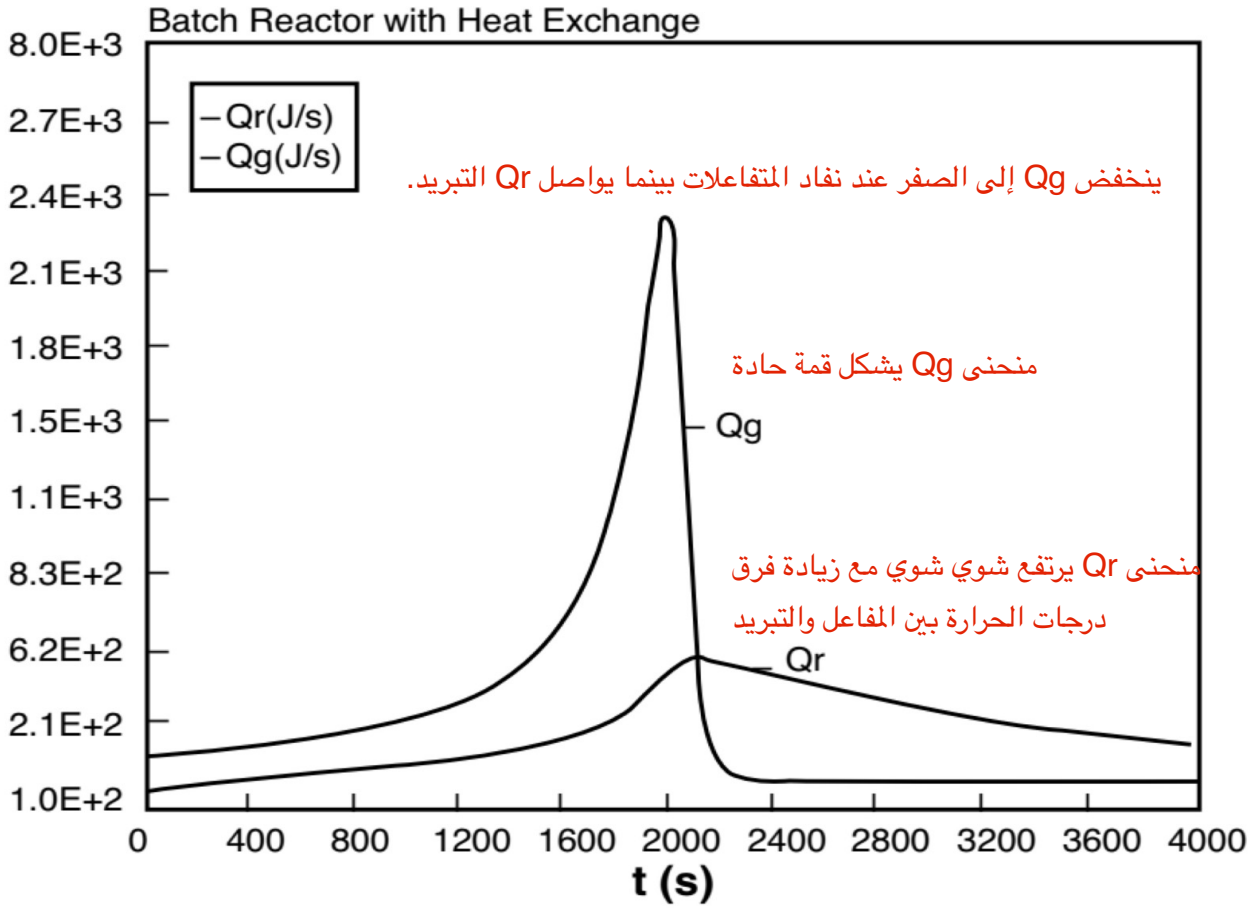


في البداية ترتفع درجة الحرارة تدريجياً نتيجة التفاعل الطارد للحرارة.

بعد م توصل القمة، تبدأ الحرارة بالانخفاض لأن المادة المتفاعلة قربت تخلص ويستمر التبريد بسحب الحرارة الي ظلت



مع ارتفاع درجة الحرارة يزداد ثابت السرعة k فتزداد نسبة التحول حتى تصل إلى 100\% عند 2000s



CHEMICAL REACTION ENGINEERING I

And That's the Reaction.

Batch
REACTOR

CSTR
REACTOR

Plug Flow
REACTOR



SAME ELEMENTS.
NEW POSSIBILITIES.