

ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

ΜΑΘΗΜΑ: ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ ΙΙ'
ΠΕΡΙΟΔΟΣ: 2014-2015
ΕΞΑΜΗΝΟ: 7^ο

ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΕΣ ΣΥΝΕΧΟΥΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ και ΠΛΗΡΟΥΣ ΑΝΑΜΙΞΗΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΕΣ ΕΜΒΟΛΙΚΗΣ ΡΟΗΣ

Στους ακόλουθους κώδικες, γράψτε τα στοιχεία σας (ονοματεπώνυμο και ΑΕΜ) όπου γίνεται σχετική αναφορά.

Όλα τα αρχεία που αφορούν στις εφαρμογές σε περιβάλλον MATLAB (m-files, m-fig, txt-files, κλπ.) πρέπει να υποβληθούν ηλεκτρονικά στη διεύθυνση: cypress@eng.auth.gr έως την καταληκτική ημερομηνία παράδοσης του θέματος. Τα αρχεία αυτά μπορεί να είναι σε html format, pdf, κλπ.

Στην αναλυτική λύση του θέματος που θα υποβληθεί σε έντυπη μορφή, θα πρέπει να επισυνάψετε μόνο τα τελικά αποτελέσματα και τα γραφήματα, ενώ δε χρειάζεται η υποβολή των m-files και των ενδιάμεσων αριθμητικών υπολογισμών.

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΛΥΣΗ

```
=====  
% [Type your Name]           %[Type your ID(AEM)]  
% program CSTR_L_dr  
clear; clc;  
%x0 = [1; 0;300];  
x0(1,1)=input ('CA?')  
x0(2,1)=input ('CB?')  
x0(3,1)=input ('T?')  
x = fsolve(@CSTR_L,x0)
```

```
function [f, Jac] = CSTR_L(x)  
Q0=1000;  
V = 10;  
k01 = 5.39e7;  
E1=9900;  
k02 = 2.91e12;  
E2=27000;  
CAin = 0.3;  
DH1=-55000;  
DH2=-71500;  
UA=40000;  
Ta=57+273;  
to=283;  
R=1.987;  
tau=V/Q0;  
cpm=200;
```

```
CA = x(1,1);  
CB = x(2,1);  
T = x(3,1);
```

```
f = zeros(3,1);
```

```

Jac = zeros(3,3);
k1=k01*exp(-E1/R/T);
k2=k02*exp(-E2/R/T);
f(1,1) = CAin-CA - tau*k1*CA;
f(2,1) = CB- tau*k1*CA + tau*k2*CB;
f(3,1) = UA*(T-Ta)+V*(DH1*k1*CA+DH2*k2*CB)-Q0*CAin*cpm*(to-T);

Jac(1,1) = - 1 - tau*k1;
Jac(1,2) = 0;
Jac(1,3) = -k1*tau*CA*E1/R/T^2;
Jac(2,1) = - tau*k1;
Jac(2,2) = 1 +tau*k2;
Jac(2,3) = -k1*tau*CA*E1/R/T^2+k2*tau*CB*E2/R/T^2;
Jac(3,1) = V*DH1*k1;
Jac(3,2) = V*DH2*k2;
Jac(3,3) = UA-Q0*CAin*cpm+V*(DH1*k1*CA*E1/R/T^2+DH2*k2*E2/R/T^2);
return

```

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 2

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΛΥΣΗ

```

=====

% [Type your Name]           %[Type your ID(AEM)]
% program thema_2_2_dr
clear; clc;

% parameters

V      =      18;           % L           1
DH     =     -50000;       % cal (mol A)-1  2
Q0     =      0.06;       % L s-1         3
CAin   =      3;         % gmol L-1      4
cpm    =      1;         % cal mol-1 K-1  5
Tin    =      298;       % K             6
ro     =     1000;       % gr L-1        7

% initial conditions
CA_0 =input('CA(0)?')
T_0=input('T(0)?')
y0   = [CA_0 T_0]';

param=[V DH Q0 CAin cpm Tin ro]';

tin   =      0;           % s
tfin  =     2000;        % s
tspan = [tin tfin];

[t,y] = ode45(@CSTR_2,tspan,[y0],[],[param]);

CA     = y(:,1);
T      = y(:,2);

figure(1)
plot(t,CA)
title('Name, ID(AEM)');
pause
figure(2)
plot(t,T)
title('Name, ID(AEM)');

```

```

pause
figure(3)
plot (CA,T)
title('Name, ID(AEM)');
pause
results = [t CA T]

function [df] = CSTR_2(t,y,param)
% parameters
V      = param(1);
DH     = param(2);
Q0     = param(3);
CAin  = param(4);
cpm    = param(5);
Tin    = param(6);
ro     = param(7);

% initial conditions
CA_0   = 0.00;           % gmol L-1
T_0    = 298;           % K
CA     = y(1,1);
T      = y(2,1);

df     = zeros(2,1);
k=5.39e7*exp(-9900/1.987/T);

df(1,1) = Q0/V*(CAin-CA)-k*CA;
df(2,1) = Q0/V*(Tin-T)-DH/(V*ro*cpm)*k*CA;

return

```

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 4

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΛΥΣΗ

```

=====
% [Type your Name]           %[Type your ID(AEM)]
% program thema_2_4_dr
clear; clc;

% parameters
E1R    = 4000;                % K                1
E2R    = 9000;                % K                2
DH1    = -20000;              % J (mol A)-1 1   3
DH2    = -60000;              % J (mol A)-1 2   4
cpA    = 90;                  % J mol-1 K-1     5
cpB    = 90;                  % J mol-1 K-1     6
cpC    = 180;                 % J mol-1 K-1     7

CAin   = 0.1;                 % mol L-1         8

Ta     = 100+273;             % C                9
UD     = 1000;                % J m-3 s-1 C     10

% initial conditions
FAin   = 100;                 % mol s-1
FBin   = 0;                   % mol s-1
FCin   = 0;                   % mol s-1
Tin    = 150+273;            % C

```

```

y0      = [FAin FBin FCin Tin]';

Vin     =      0;                % s
Vfin    =      1;                % s
Vspan   = [Vin Vfin];
param   = [E1R E2R DH1 DH2 cpA cpB cpC CAin Ta UD]';

[V,y] = ode45(@thema_2_4,Vspan,[y0],[ ],[param]);

FA      = y(:,1);
FB      = y(:,2);
FC      = y(:,3);
T       = y(:,4);

figure (1)
plot(V,FA, 'r',V,FB, 'b',V,FC, 'g')
title('Name, ID(AEM)');
pause
figure(2)
plot(V,T)
title('Name, ID(AEM)');
results = [V FA FB FC T]

function [df] = thema_2_4(V,y,param)
E1R=param(1);
E2R=param(2);
DH1=param(3);
DH2=param(4);
cpA=param(5);
cpB=param(6);
cpC=param(7);
CAin=param(8);
Ta=param(9)
UD=param(10);

% initial conditions
FAin    =    100;                % mol s-1
FBin    =     0;                % mol s-1
FCin    =     0;                % mol s-1
Tin     =   150+273;            % C

FA      = y(1,1)
FB      = y(2,1)
FC      = y(3,1)
T       = y(4,1)

FT =FA +FB +FC;

df      = zeros(4,1);
k1=10*exp(E1R*(1/300-1/T));
k2=.09*exp(E2R*(1/300-1/T));

CA=CAin*(FA/FT)*Tin/T
CB=CAin*(FB/FT)*Tin/T
CC=CAin*(FC/FT)*Tin/T
df(1,1) = - k1*CA-k2*CA^2;
df(2,1) =  k1*CA;
df(3,1)=0.5*k2*CA^2;
Fcp=FA*cpA+FB*cpB+FC*cpC;
df(4,1)=(4*UD*(Ta-T)-DH1*k1*CA-DH2*k2*CA^2)/Fcp;
return

```

