

2) Masse- og mol-balancer for batch og kontinuerte processer

Massebalance

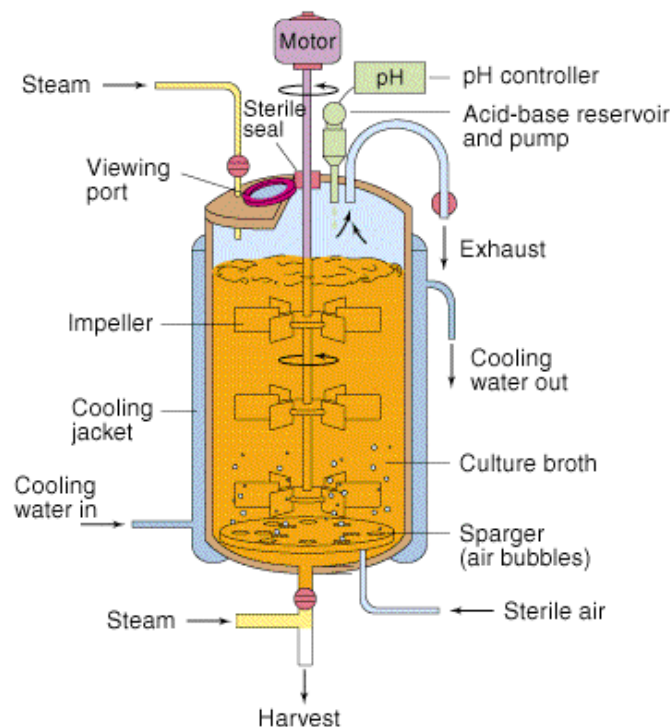
For enhver proces gælder loven om massens konstans. Det betyder, at massen af det substrat, som tilføres processen, kan genfindes som produkt eller som en uomsat rest, når processen er løbet til ende. Til processen kan opstilles en massebalance, der beskriver udviklingen af masse (M) over tid:

$$dM/dt = M_{\text{ind}} - M_{\text{ud}} + M_{\text{dannet}} - M_{\text{forbrugt}}$$

Massebalancen er gældende for et afgrænset system. Systemet kan være **lukket**, så der ikke passerer masse over grænserne mellem systemet og dets omgivelser eller **åbent** såfremt udveksling af masse med omgivelserne er muligt.

Som eksempel på et lukket system kan nævnes en **batch proces**, som foregår i en lukket reaktor, hvor al substrat tilføres systemet fra starten af processen og al produkt fjernes, når processen er løbet til ende. Omsættes en del af substratet til varme, der afgives til omgivelserne kan man ikke tale om et fuldstændig lukket system.

På illustrationen ses en bioreaktor beregnet til dyrkning af mikroorganismer (Brock Biology of Microorganisms, 1997).



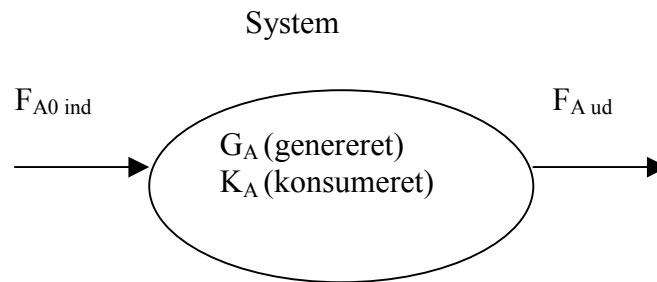
Der er ingen tilledning af substrat og processen benævnes derfor en batch proces også selvom en del af substratet omsættes til varme og en del af substratet ved en aerob proces omsættes til CO_2 , der udledes som afgangsgas.

Mol-balancer

På samme måde som massebalancer knytter der sig til enhver proces en generel **mol-balance**, hvor udviklingen i mol over tid for stoffet A kan udtrykkes

mol/tid: akkumuleret = tilledt – udledt + genereret - konsumeret

$$dN_A/dt = F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}} + G_A - K_A$$



For en given reaktion $A + B \rightarrow C + D$ vil vi betragte omsætningen af substrat til produkt enten som en netto konsumtion af substrat eller som en netto produktion af produkt.

For substratet A som forbruges med reaktionshastigheden $r_A = k \cdot C_A$ fås

$$K_A = r_A V = k \cdot C_A V$$

hvor

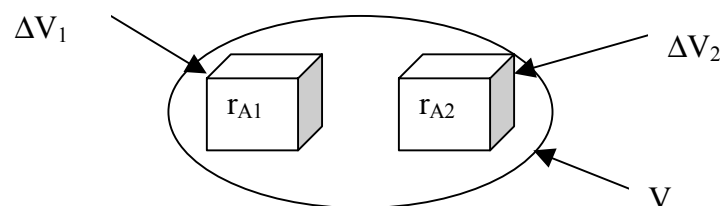
r_A : volumetriske reaktionshastighed (mol/l min)

C_A : koncentration af stoffet A (mol/l)

V : reaktorvolumen (l)

Såfremt reaktionen ikke forløber under helt identiske betingelser overalt i reaktoren som følge f.eks. af variation i reaktorvolumenets temperatur, vil der være tilsvarende variation i reaktionshastigheden og vi betragte reaktionshastigheden i mindre delvolumener, som indenfor det enkelte delvolumen er ensartet.

Opdeling af reaktor volumenet



For delvolumenet opskrives konsumtionshastigheden $\Delta K_{A1} = r_{A1} \Delta V_1$

Er det samlede reaktor volumen delt op i ialt \emptyset delvolumener er den totale konsumtionshastighed

$$K_A = \sum \Delta K_{A_i} = \sum r_{A_i} \Delta V_i \quad \text{hvor } i=1 \dots \emptyset$$

Ved opdeling af reaktoren i et antal infinitesimalt delvolumener dvs. $\emptyset \rightarrow \infty$ og $\Delta V \rightarrow 0$ kan den totale konsumtionshastighed opskrives

$$K_A = \int r_{A_i} dV$$

Betragtes konsumtionen af A kan den generelle mol-balance dermed opskrives

$$\begin{aligned} dN_A/dt &= F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}} - K_A \\ &= F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}} - \int r_{A_i} dV \end{aligned}$$

Batch reaktor

For en batch reaktor, hvor der hverken tilledes eller udledes stof, opskrives mol-balancen for stoffet A

$$dN_A/dt = - \int r_{A_i} dV$$

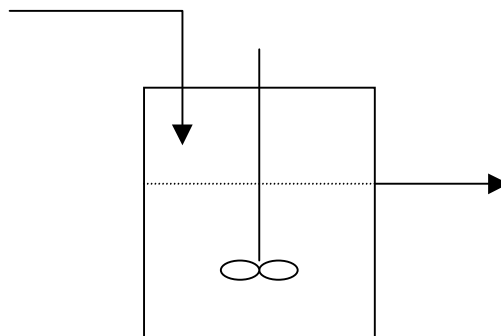
Såfremt reaktionsbetingelserne er ens overalt i reaktorens volumen skrives mol-balancen

$$dN_A/dt = - r_A V \quad \text{eller} \quad 1/V dN_A/dt = - r_A$$

Er volumenet konstant fås $d(N_A/V)/dt = d(C_A)/dt = - r_A$

Kontinuert reaktor (Continuous Stirred Tank Reactor, CSTR)

Det specielle ved flow systemer er at der hele tiden tilføres substrat til reaktionen og hele tiden udledes uomsat substrat og dannet produkt en reaktor med konstant volumen.



For en CSTR kan mol-balancen opskrives som følger

$$dN_A/dt = F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}} - \int r_{Ai} dV$$

Er processen i ligevægt (steady state) bliver

$$dN_A/dt = 0 \text{ dvs } F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}} = \int r_{Ai} dV$$

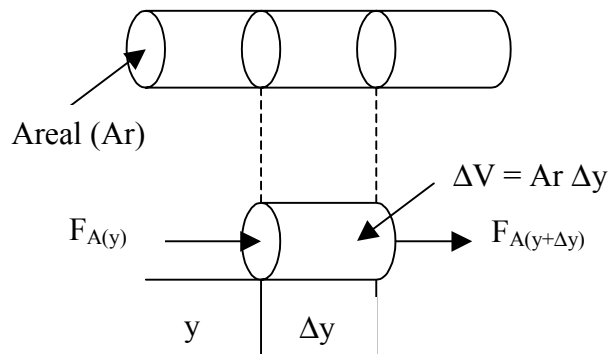
såfremt der ikke er variation i reaktionsbetingelserne gælder $\int r_{Ai} dV = r_A V$ dermed bliver mol-balancen for en CSTR

$$V = (F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}}) / r_A$$

Plug Flow Reaktor (PFR)

I en PFR ændrer koncentrationen af stoffet A (C_A) sig i reaktorens længderetning. Dermed er reaktionshastigheden (r_A) en funktion af længderetningen med undtagelse af 1. ordens reaktioner, hvor r_A er uafhængig af C_A .

Betragtes den generelle balance $dN_A/dt = F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}} - \int r_{Ai} dV$ for delvolumenet ΔV med længden Δy fås: $dN_A/dt = F_{A(y)} - F_{A(y+\Delta y)} - r_{A\Delta y} \Delta V$



ved ligevægt (steady state) fås

$$F_{A(y)} - F_{A(y+\Delta y)} - r_{A\Delta y} \Delta V = 0 \Rightarrow$$

$$F_{A(y)} - F_{A(y+\Delta y)} = r_{A\Delta y} \Delta V \wedge \Delta V = Ar \Delta y \Rightarrow$$

$$-(F_{A(y+\Delta y)} - F_{A(y)}) / \Delta y = r_{A\Delta y} Ar$$

dvs

$$- dF_{A(y)} / dy = r_{A\Delta y} Ar \wedge \Delta y \rightarrow 0$$

$$- dF_{A(y)} = r_{A\Delta y} dV \wedge dV = Ar dy \Rightarrow$$

$$- dF_{A(y)} / dV = r_{A\Delta y}$$

Mol-balancen for en PFR kan dermed opstilles: $dF_A / dV = - r_A$

En oversigt over mol-balancerne for de tre systemer er således

System	Batch	CSTR	PFR
mol-balance	$dN_A/dt = - r_A V$	$V = (F_{A0 \text{ ind}} - F_{A \text{ ud}}) / r_A$	$dF_A / dV = - r_A$