

제 8 장 정상상태 비등온 반응기 설계 (Steady State Nonisothermal Reactor Design)

8.1 서론

8장에서는 정상상태 비등온 반응기 설계에 대해서 설명합니다.
이 전까지는 등온 반응기를 다루었는데, 산업 현장에서는 등온 반응기는 드물고, 단열반응기의 경우가 되거나, 반응열을 제거하거나, 또는 가열하는 경우가 많습니다. 비등온 반응기는 실제 반응기를 다루는데 있어서 현실적이므로 학부 과정에서 매우 중요한 공부 내용입니다.

8.2 에너지 수지

8.2.1 열역학 제1법칙

닫힌계에서 에너지수지

$$d\hat{E} = \delta Q - \delta W$$

열린계에서 에너지수지

$$\left[\begin{array}{c} \text{계 내부의} \\ \text{에너지} \\ \text{축적속도} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{주위에서} \\ \text{계로의} \\ \text{열흐름속도} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{계가} \\ \text{주위에 행한} \\ \text{일의 속도} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{물질이 계로의} \\ \text{유입에 따른} \\ \text{에너지유입속도} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{물질이 외부로의} \\ \text{유출에 따른} \\ \text{에너지 유출속도} \end{array} \right]$$

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

n개의 성분을 갖는 열린계의 비정상상태 에너지수지

$$\frac{d\hat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n E_i F_i \Big|_{in} - \sum_{i=1}^n E_i F_i \Big|_{out}$$

위 식은 흐름 반응기에서 에너지 수지식인데, 이 자체로는 전화율과 온도의 관계나 나타나 있지 않으므로 위 식을 사용하기 쉽게 고쳐 나갑니다.

8.2.2 일의 계산

흐름일은 물질이 계를 출입하는 데 필요한 일이다.

전단응력이 없을때의 일 $\dot{W} = \overbrace{-\sum_{i=1}^n F_i PV_i \Big|_{in} + \sum_{i=1}^n F_i PV_i \Big|_{out}}^{\text{[흐름일 속도]}} + \dot{W}_s$

$$F_i P \tilde{V}_i [=] \frac{\text{mol}}{s} \frac{\text{Newton}}{m^2} \frac{m^3}{\text{mol}} = (\text{Newton} \cdot m) \frac{1}{s} = \text{Joules} / s = \text{Watts}$$

\dot{W}_s 는 축일이라 하고 대부분의 흐름일은 계의 경계를 통하여 물질의 흐름이 있을때 나타나는 에너지수지식의 항들과 결합된다.

$$\frac{d\hat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_i (E_i + PV_i) \Big|_{in} - \sum_{i=1}^n F_i (E_i + PV_i) \Big|_{out}$$

$$F_i \left(\frac{u_i^2}{2} + gz_i + \text{other} \right)$$

$$E_i = U_i + \frac{u_i^z}{2} + gz_i + other$$

운동에너지, 위치에너지, 엔탈피, 열전달과 일에 비하여 무시될 수 있는 에너지항들을 생략

$$E_i = U_i$$

엔탈피 H_i (J/mol)는
$$H_i = U_i + P\tilde{V}_i = \left[\frac{J}{moli} \right] or \left[\frac{Btu}{lbmol} \right] or \left[\frac{cal}{moli} \right]$$

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

$$\frac{d\hat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i$$

8.2.3 에너지수지 총괄

아래 표 8.1은 8장의 내용을 요약한 것이나 공부하기 전에는 잘 이해가 안 됩니다. 우선 8장을 공부하고나서 들여다 보면 이해가 되고, 필요한 경우 마다 적용하시기 바랍니다.

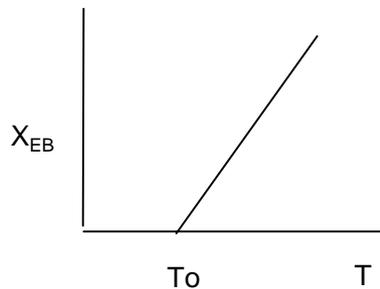
표 8-1 일반적인 반응기의 에너지수지식

1. 단열 ($\dot{Q} \equiv 0$) CSTR, PFR, 회분식, 또는 PBR. $\dot{W}_s \equiv 0$, 일정한 C_p 및 $\Delta C_p = 0$ 및 X_{EB} 와 온도의 상관관계는

$$X_{EB} = \frac{\sum \theta_i C_{P_i} (T - T_0)}{-\Delta H_{RX}}$$

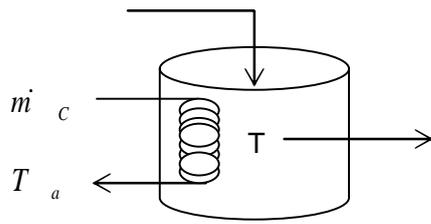
$$T = T_0 + \frac{(-\Delta H_{RX})X}{\sum \theta_i C_{P_i}}$$

발열반응에 대하여



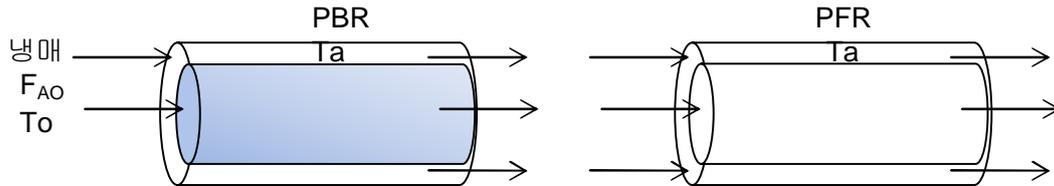
2. 열교환기가 설치된 CSTR, $UA(T_a - T)$, 큰 냉매유량

2. 열교환기가 설치된 CSTR, $UA(T_a - T)$, 큰 냉매유량



$$X_{EB} = \frac{\left(\frac{UA}{F_{A0}} (T - T_a) \right) + \sum \theta_i C_{P_i} (T - T_0)}{-\Delta H_{RX}}$$

3. 열교환이 있는 PFR/PBR



3A. PBR(전화율)

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{Ua}{\rho_b} (T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX} (T)}{F_{A0} \left(\sum \theta_i C_{P_i} + \Delta C_P X \right)}$$

3B. PFR(전화율)

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX} (T)}{F_{A0} \left(\sum \theta_i C_{P_i} + \Delta C_P X \right)}$$

3C. PBR(몰유량)

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{Ua}{\rho_b} (T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX} (T)}{\sum F_i C_{P_i}}$$

3D. PFR(몰유량)

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX} (T)}{\sum F_i C_{P_i}}$$

4. 회분식

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-r'_A V)(-\Delta H_{RX}) - UA(T - T_a)}{\sum N_i C_{P_i}}$$

5. 반회분식 또는 비정상

6. PFR에서 복합반응

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - \sum_{i=0}^n F_{i0} (C_{P_i} (T - T_{i0}) + [-\Delta H_{RX}(T)](-r_A V))}{\sum_{i=0}^n N_i C_{P_i}}$$

7. 냉매 온도 Ta가 변하는 경우

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + \sum r_{ij} \Delta H_{RXij}}{\sum F_i C_{P_i}}$$

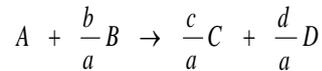
$$\frac{dT_a}{dV} = \frac{Ua(T - T_a)}{\dot{m}_c C_{P_c}}$$

8.2.4 반응열을 구하기 위한 정상상태 몰유량 분석

정상상태에서 조작되는 흐름계 에너지수지는 에너지 축적속도 $\frac{\hat{E}_{sys}}{dt}$ 가 0일때

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i = 0$$

다음의 일반적인 화학반응에서



다음 화학반응의 유입 유출항은 다음과 같다.

$$\text{유입} \quad \sum H_{i0} F_{i0} = H_{A0} F_{A0} + H_{B0} F_{B0} + H_{C0} F_{C0} + H_{D0} F_{D0}$$

$$\text{유출} \quad \sum H_i F_i = H_A F_A + H_B F_B + H_C F_C + H_D F_D$$

일반적으로 축적이 없는 경우에 성분 i의 몰유량과 화학계수는

$$F_i = F_{A0} (\Theta_i + \nu_i X)$$

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

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

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

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

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

$$\left. \begin{array}{l} F_B = F_{A0} \left(\theta_B - \frac{b}{a} X \right) \\ F_C = F_{A0} \left(\theta_C + \frac{c}{a} X \right) \\ F_D = F_{A0} \left(\theta_D - \frac{d}{a} X \right) \\ F_I = \theta_I F_{A0} \end{array} \right\} \text{여기서 } \theta_i = \frac{F_{i0}}{F_{A0}}$$

$$\sum H_{i0} F_{i0} - \sum H_i F_i = F_{A0} [(H_{A0} - H_A) + (H_{B0} - H_B) \Theta_B + (H_{C0} - H_C) \Theta_C$$

$$\sum H_{i0}F_{i0} - \sum H_i F_i = F_{A0} [(H_{A0} - H_A) + (H_{B0} - H_B)\Theta_B + (H_{C0} - H_C)\Theta_C + (H_{D0} - H_D)\Theta_D] - \underbrace{\left(\frac{d}{a}H_D + \frac{c}{a}H_C - \frac{b}{a}H_B - H_A \right)}_{\Delta H_{Rx}} F_{A0} X$$

에너지수지식은 다음과 같다.

아래 식은 에너지 수지식을 변형해서 전화율이 포함된 식으로 정리 했습니다. 계속해서 온도가 포함된 식으로 변형해 보겠습니다.

$$\frac{d\widehat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + F_{A0} \sum \Theta_i (H_{i0} - H_i) - \Delta H_{Rx}(T) F_{A0} X$$

정상상태에서 에너지수지식

$$0 = \dot{Q} - \dot{W}_s + F_{A0} \sum \Theta_i (H_{i0} - H_i) - \Delta H_{Rx}(T) F_{A0} X$$

8.2.5 엔탈피의 분석

특정 온도와 압력에서 i성분의 몰 엔탈피 H_i 는 임의의 기준 온도 T_R 에서 i성분의 생성엔탈피 $H_i^o(T_R)$ 과 온도가 기준온도에서 어떤 온도 T 까지 상승할 때 생긴 엔탈피변화 H_{Qi} 의 합으로 표시한다.

$$H_i = H_i^o(T_R) + \Delta H_{Qi}$$

온도 T 에서 i 성분의 엔탈피를 기준온도 T_R 에서의 생성엔탈피항으로 표시하면

$$H_i = H_i^o(T_R) + \int_{T_R}^T C_{Pi} dT$$

상변화없이 입구온도 T_{i0} 에서 온도 T 로 가열될때의 엔탈피변화를 계산하기 위해서 다음식을 얻는다.

$$\begin{aligned} H_i - H_{i0} &= \left[H_i^o(T_R) + \int_{T_R}^T C_{Pi} dT \right] - \left[H_i^o(T_R) + \int_{T_R}^{T_{i0}} C_{Pi} dT \right] \\ &= \int_{T_{i0}}^T C_{Pi} dT = C_{Pi} [T - T_{i0}] \end{aligned}$$

$$\frac{d\widehat{E}_{sys}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i C_{Pi} [T - T_{i0}] - \Delta H_{Rx}(T) F_{A0} X = 0 \quad (8-22)$$

8.2.6 $\Delta H_{Rx}(T)$, $\Delta H_{Rx}^o(T_R)$ 과 ΔC_P 의 관계

온도 T 에서의 반응열은 온도 T 에서 각성분의 엔탈피 항으로 주어진다.

$$\Delta H_{Rx}(T) = \frac{d}{a}H_D(T) + \frac{c}{a}H_C(T) - \frac{b}{a}H_B(T) - H_A(T)$$

각 성분의 엔탈피는

$$H_i = H_i^o(T_R) + \int_{T_R}^T C_{Pi} dT = H_i^o(T_R) + C_{Pi}(T - T_R)$$

각 성분의 엔탈피를 치환하면

$$\Delta H_{Rx}(T) = \left[\frac{d}{a} H_D^o(T_R) + \frac{c}{a} H_C^o(T_R) - \frac{b}{a} H_B^o(T_R) - H_A^o(T_R) \right] + \int_{T_R}^T \left[\frac{d}{a} C_{PD} + \frac{c}{a} C_{PC} - \frac{b}{a} C_{PB} - C_{PA} \right] dT$$

위에 식에서 우변 첫째 항은 기준온도 T_R 에서의 반응열이다.

$$\Delta H_{Rx}^o(T_R) = \frac{d}{a} H_D^o(T_R) + \frac{c}{a} H_C^o(T_R) - \frac{b}{a} H_B^o(T_R) - H_A^o(T_R)$$

$$\Delta C_P = \frac{d}{a} C_{PD} + \frac{c}{a} C_{PC} - \frac{b}{a} C_{PB} - C_{PA}$$

$$\Delta H_{Rx}(T) = \Delta H_{Rx}^o(T_R) + \int_{T_R}^T \Delta C_P dT$$

임의의 온도에서 반응열을 계산할 수 있는지를 알아보기 위해 식(8-22)를 치환하면

$$\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i C_{Pi} [T - T_{i0}] - [\Delta H_{Rx}^o(T_R) + \Delta C_P(T - T_R)] F_{A0} X = 0$$

대부분의 계에서 일 \dot{W}_s 은 무시할 수 있으므로.

$$\dot{Q} - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i C_{Pi} [T - T_{i0}] - [\Delta H_{Rx}^o(T_R) + \Delta C_P(T - T_R)] F_{A0} X = 0$$

위 식은 정상상태 에너지 수지식을 이제 반응기 설계에 이용할 수 있도록 유도된 식입니다. 위 식으로는 전화율, 온도, 또는 반응기 부피를 계산하는데 이용할 수 있습니다.

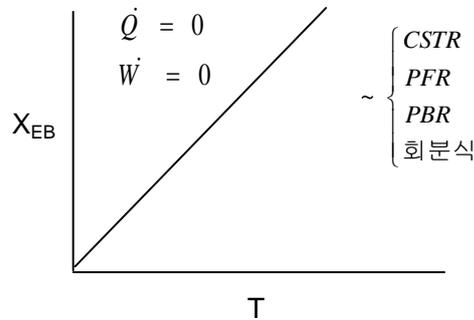
8.3 단열조작

반응 장치를 잘 보온시키면 단열반응기 입니다. 따라서 단열 조작은 산업 현장에서 많이 하고 있는 조작 방법입니다.

8.3.1 단열 에너지수지

일이 없고 단열조작의 특수한경우

$$X = \frac{\sum \theta_i C_{P_i} (T - T_{i0})}{-\left[\Delta H_{Rx}^o(T_R) + \Delta C_P (T - T_R) \right]} \quad (8-29)$$



단열상태의 온도-전화율 상관관계도

위 그림은 매우 중요한데, 단열 조작을 하면, 반응기 종류에 상관없이 온도와 전화율은 1차식의 상관 관계가 있습니다. 단순한 관계이니 얼마나 좋은지 모르겠습

8.3.2 단열 관형반응기

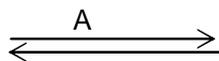
온도에 대한 전화율의 함수로 재정리하면

$$T = \frac{X \left[-\Delta H_{Rx}(T_R) + \sum \theta_i C_{P_i} T_0 + X \Delta C_P T_R \right]}{\sum \theta_i C_{P_i} + X \Delta C_P}$$

단열 조작되는 PFR과 PBR을 풀기 위한 알고리즘

관형반응기의 몰수지 식은 이미 잘 배웠습니다. 반응기 부피를 계산하기 위해 서 반응속도식을 적분해야 하는데, 반응속도식의 속도상수가 전화율(온도)의 함수기 때문에 반응속도상수가 적분기호 안 쪽에 있습니다. 그래서 이 부분을 적분하기 위해서 수치 적분을 이용합니다.

다음과 같은 기상 가역 기초반응이 압력강하가 무시될 수 있는 PFR내에서 진행되고, 순성분 A가 반응기에도 도입된다.



몰수지식:

$$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}} \quad (TR-2 1)$$

속도법칙

$$-r_A = k \left(C_A - \frac{C_B}{K_C} \right) \quad (TR-2 2)$$

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

화학양론식

$$k = k_1 \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right)\right] \quad (T8-2 3)$$

$$K_C = K(T_2) \exp\left[\frac{\Delta H_{Rx}^o}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T}\right)\right] \quad (T8-2 4)$$

기상 , $\varepsilon = 0, P = P_0$

$$C_A = C_{A0} (1 - X) \frac{T_0}{T} \quad (T8-2 5)$$

$$C_B = C_{A0} X \frac{T_0}{T} \quad (T8-2 6)$$

결합

$$-r_A = k C_{A0} \left[(1 - X) - \frac{X}{K_C} \right] \frac{T_0}{T} \quad (T8-2 7)$$

에너지 수지식:

온도와 전حويل 관계를 설명하기 위하여 단열 PFR에 에너지 수지식을 적용시킨다. 모든 성분이 동일 온도로 반응기에 도입되면, $T = T_0$ 이다. 일때, T를 전حويل의 함수를 구하기 위하여 식(8-29)를 풀면 다음 식을 얻는다. $Q = 0, \dot{W}_s = 0$

$$T = \frac{X[-\Delta H_{Rx}^o(T_R)] + \sum \theta_i C_{P_i} T_0 + X \Delta C_p T_R}{\sum \theta_i C_{P_i} + X \Delta C_p} \quad (T8-2 8)$$

순성분 A가 들어오고,

$$\Delta C_p = 0$$

$$T = T_0 + \frac{X[-\Delta H_{Rx}^o(T_R)]}{C_{P_A}} \quad (T8-2 9)$$

단열 PFR/PBR 반응기에 대한 풀이 과정

A. 수치해석기법

PFR물수지식을 적분시킨다.

$$V = \int_0^{X_3} \frac{F_{A0}}{-r_A} dX \quad (T8-2 10)$$

1. X=0로 둔다.

2. 식(T8-2.9)를 사용하여 T를 계산한다.

3. 식(T8-2.8)을 사용하여 T를 계산한다.

1. X=0로 둔다.
2. 식(T8-2.9)를 사용하여 T를 계산한다.
3. 식(T8-2.3)을 사용하여 k를 계산한다.
4. 식(T8-2.4)를 사용하여 Kc를 계산한다.
5. To/T(기상)를 계산한다.
6. 식(T8.2-7)을 사용하여 -rA를 계산한다.
7. (FA0/-rA)를 계산한다.
8. X가 규정된 X3보다작으면, 증분 X(즉 Xi+1=Xi+ΔX)가 되고, 2단계로 간다.
9. X대 (FA0/-rA)의 표를 작성한다.
10. 부록 A에 제시된 수치적분 공식을 사용한다.

$$V = \int_0^{X_3} \frac{F_{A0}}{-r_A} dX = \frac{3}{8} h \left[\frac{F_{A0}}{-r_A(X=0)} + 3 \frac{F_{A0}}{-r_A(X_1)} + 3 \frac{F_{A0}}{-r_A(X_2)} + \frac{F_{A0}}{-r_A(X_3)} \right] \quad (T8-2 11)$$

B. 상미분방정식(ODE)풀이자

$$h = \frac{X_3}{3}$$

1.

$$2. \frac{dX}{dV} = \frac{kC_{A0}}{F_{A0}} \left[(1-X) - \frac{X}{K_C} \right] \frac{T_0}{T} \quad (T8-2 12)$$

$$3. k = k_1(T_1) \exp \left[\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (T8-2 13)$$

$$4. K_C = K_{C2}(T_2) \exp \left[\frac{\Delta H_{Rx}}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (T8-2 14)$$

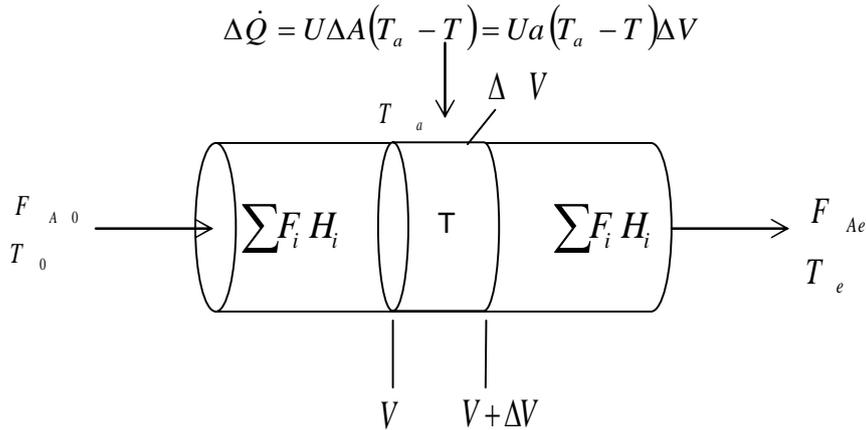
$$5. \text{파라미터 값 } \frac{X \left[-\Delta H_{Rx}(T_R) \right]}{T} \quad \text{를 } (T8-2 15)$$

6. 초기값 $X=0, V=0$ 와 최종값 반응기 부피 $V=V_f$ 를 넣는다.

$$k_1, E, R, K_{C2}, \Delta H_{Rx}(T_R), C_{p_A}, C_{A0}, T_0, T_1, T_2$$

8.4 열교환기가 설치된 정상상태 관형반응기

열 교환기가 설치되면 열 Q가 제로가 아닙니다. 이 Q를 계산하는 방법이 한 3개의 식으로 표시 됩니다. 여기에는 한 개만 나타 냈는데, 나머지 두 개는 코일형이 반응기 속에 들어가 있어서(자켓도 마찬가지 입니다) 냉매의 입력 온도와 출력 온도가 다른 경우 입니다. 교과서에 잘 정리 되어 있으니 각자가 두 개의 식을 정리 해 놓기 바랍니다.



8.4.1 PFR의 에너지수지식 유도

$\dot{W}_s = 0$ 일때, 부피 ΔV 에 관한 에너지수지를 취한다.

$$\Delta \dot{Q} + \sum F_i H_i |_{V} - \sum F_i H_i |_{V+\Delta V} = 0$$

반응기로의 열흐름

$$\Delta \dot{Q} = U \Delta A (T_a - T) = U a \Delta V (T_a - T)$$

a 는 반응기 단위부피당의 열교환 면적

$$a = \frac{A}{V} = \frac{\pi D L}{\pi D^2 L} = \frac{4}{D}$$

$\Delta \dot{Q}$ 를 치환시키고 ΔV 로 나누어서 $\Delta V \rightarrow 0$ 하면

$$U a (T_a - T) - \frac{d \sum (F_i H_i)}{dV} = 0$$

$$U a (T_a - T) - \sum \frac{dF_i}{dV} H_i - \sum F_i \frac{dH_i}{dV} = 0$$

$$\frac{dF_i}{dV} = r_i = \nu_i (-r_A) \quad \frac{dH_i}{dV} = C_{P_i} \frac{dT}{dV}$$

치환하면

$$U a (T_a - T) - \underbrace{\sum \nu_i H_i (-r_A)}_{\Delta H_{Rx}} - \sum F_i C_{P_i} \frac{dT}{dV} = 0$$

$$\boxed{\frac{dT}{dV} = \frac{\overbrace{r_A \Delta H_{Rx}}^{\text{열 "생성" }} - \overbrace{U a (T - T_a)}^{\text{열 제거}}}{\sum F_i C_{P_i}}}$$

전환율에 관한 식으로 치환하면

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + (r_A)(\Delta H_{Rx})}{F_{A0} \left(\sum \theta_i C_{P_i} + \Delta C_p X \right)}$$

반응기의 부피에 따라 온도가 변하는 것을 설명하는 미분방정식

$$\frac{dT}{dV} = g(X, T)$$

$$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}} = f(X, T)$$

냉매온도가 반응기에 따라 변하면

$$\frac{dT_a}{dV} = \frac{U_a(T - T_a)}{\dot{m}_c C_{P_c}}$$

위의 세 식은 모두 미분방정식이니 손으로는 풀기 어렵고 ODE 풀이기를 이용해야 합니다.

8.6 열효과가 있는 CSTR \dot{Q}

$$\dot{Q} = \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]}$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{흐름에 따른} \\ \text{유입에너지 속도} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{흐름에 따른} \\ \text{유출에너지 속도} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{열교환기에서 반응기로의} \\ \text{열전달 속도} \end{array} \right] = 0$$

$$\dot{m}_c C_{P_c} (T_{a1} - T_R) - \dot{m}_c C_{P_c} (T_{a2} - T_R) - \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]} = 0$$

냉매유체의 출구온도를 얻기위해 식을 풀면

$$T_{a2} = T - (T - T_{a1}) \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{P_c}}\right)$$

위 식으로 부터

$$Q = \dot{m}_c C_{P_c} (T_{a1} - T_{a2})$$

T_{a2} 를 대입하면

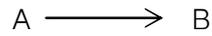
$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{P_c} \left\{ (T_{a2} - T) \left[1 - \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{P_c}}\right) \right] \right\}$$

$T_{a1} \approx T_{a2} = T_a$ 가 되는 경우

$$\dot{Q} = UA(T_a - T)$$

비등온 CSTR 반응기 설계 알고리즘

1차 비가역 액상반응을 단열상태로 수행한다.



1. CSTR의 설계방정식

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

2. 속도식

$$-r_A = kC_A \quad k = Ae^{-E/RT}$$

3. 화학양론식 (액상, $v = v_0$)

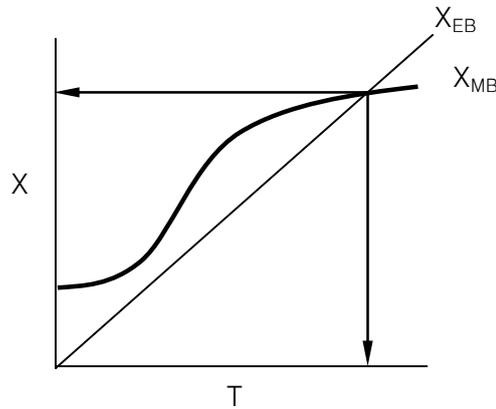
$$C_A = C_{A0} (1 - X)$$

4. 결합

$$V = \frac{v_0}{Ae^{-E/RT}} \left(\frac{X}{1 - X} \right)$$

$$T = T_0 + \frac{X (-\Delta H_{Rx}^0)}{\tilde{C}_{PA}}$$

V가 결정되면 그 크기에 맞는 CSTR 반응기 운전조건 X, T를 구해야 한다. 그런경우 위의 식 V, T에 관한 비선형 연립방정식을 풀어야 하고, 그 내용이 아래 그림에 있다.



< Plot X vs T >