Ideal Reaktor - Värmebalanser

Tors LV2

Reaktioner - endo- eller exoterma

Reaktionshastigheten påverkas av temperaturändringar

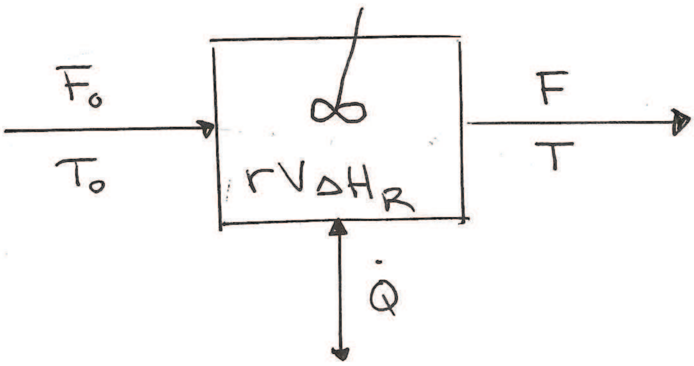
$$\dot{Q} = UA(T_a - T) \longrightarrow \begin{cases} U \text{ - total värme överf. koeff.} \\ A \text{ - värmeöverf. Area} \\ T_a = \text{fluid temp.} \\ T \text{ - reaktor temp.} \end{cases}$$

CSTR:

T_a kan variera ty

$$\dot{Q} = UA\Delta T_{lm} = UA \frac{\Delta T_{A_1} - \Delta T_{A2}}{\ln\left(\frac{T_{A_1} - T}{T_{A_2} - T}\right)}$$

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h} + \frac{1}{k} + \frac{1}{h}}$$



Värmebalans

$$\sum F_{i,0} \int_{T_{ref}}^{T_0} C_{p_i}\, dT - \sum F_i \int_{T_{ref}}^{T} C_{p_i}\, dT + rV(-\Delta H_R(T_{ref})) + \dot{Q} = \sum N_i \frac{dH}{dt}$$

$T_{ref} = T$:

$$\sum F_{i,0} \int_T^{T_0} c_{p_i} dT + rV(-\Delta H_R(T)) + \underbrace{\dot{Q}}_{UA\Delta T_{lm}} = \underbrace{\sum N_i \frac{dH}{dt}}_{=0 \text{ vid steady-state}}$$

Obs! Värmebalansen gäller för en tank reaktor (ideal)

Molbalans (för ideal tank):

$$F_{j,0} - F_j + (\nu_j r)V = 0 \longrightarrow rV = \frac{X_j F_{i,0}}{(-\nu_j)}$$

För en batch reaktor gäller värmebalansen för en ~~unsteady~~ tank vid unsteady-state med ändringarna:

$$\begin{cases} F_{i,0} = F_i = 0 \\ \sum c_{p_i} N_i \dfrac{dT}{dt} = -rV\Delta H_R(T) + \dot{Q} \end{cases}$$

$$\longrightarrow \frac{dT}{dt} = \frac{-rV\Delta H_R(T) + \dot{Q}}{\sum_i N_i c_{p_i}}$$

Tubreaktor:

$$\sum F_i \int_{T_{ref}}^{T} c_{p_i} dT - \sum F_i \int_{T_{ref}}^{T+dT} c_{p_i} dT - r\Delta H_R(T_{ref})dV + d\dot{Q} = 0$$

$$\sum F_i c_{p_i} \frac{dT}{dV} = r(-\Delta H_R(T)) + Ua(T_a - T)$$

Måste användas om icke-adiab.

$$\sum F_{i,0}\int_{T_{ref}}^{T_0} Cp_i\,dT - \sum F_i \int_{T_{ref}}^{T_i} Cp_i\,dT + \frac{X_j F_{j,0}}{(-\nu_j)}\left(-\Delta H_R(T_{ref})\right) = 0$$

Ex. Icke-isoterma Reaktorer

$$T + H \rightarrow B + M \quad \left(C_7H_8 + H_2 \rightarrow C_6H_6 + CH_4\right)$$

$\Delta H_R = -58.97\ \text{kJ/mol}$ exoterm pga negativ

$Cp_{gas} = 151\ \text{J/mol}\cdot\text{K}$ kan antas vara konst.

$T:H = 1:1$ mol

$F_{T,0} = 1000\ \text{mol/h}$

$T = 700\ °C\ (973\ K)$

$P_{tot} = 40\ \text{atm}$ konstant

$X_T = 0.5$

$K = 1.1\cdot 10^7 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$, $E = 213\ \text{kJ/mol}$

$r = kC_H^{0.5}C_T$

(a) om en adiabatisk tubreaktor används, vilken volym på reaktorn krävs?

$$\frac{dF_T}{dV} = r_T \qquad \left\{ F_T = F_{T_0} - X_T F_{T,0} \right\}$$

$$\rightarrow \quad -F_{T,0}\frac{dX_T}{dV} = kC_H^{0.5}C_T$$

$$\int_0^V dV = F_{T,0}\int_0^{0.5}\frac{dX_T}{kC_H^{0.5}C_T}$$

$\left\{ k = k(T) \text{ dvs ej konst!} \right\}$

fkn. av utbytet

$$C_H = y_H\frac{P}{RT} = \frac{F_H}{F_{tot}}\cdot\frac{P}{RT} = \frac{F_{H_0}-F_{H_0}X}{\underbrace{2F_{H,0}}_{=F_{H,0}+F_{T,0}}}\cdot\frac{P}{RT} =$$

konst.

$$C_H = (1-X_T)\frac{P}{2RT}$$

$C_T \equiv C_H$ ty 1:1 förhållande!

$$\longrightarrow V = F_{T,0}\int_0^{0.5}\frac{dX_T}{A\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)(1-X_T)^{1.5}\cdot\left(\frac{P}{2RT}\right)^{1.5}}$$

Behöver ett förhållande mellan temperatur och utbyte
→ Värmebalans!

VB:

adiabatisk!

$$\sum F_{i,0}\int_{T_{ref}}^{T_0} cp_i\,dT - \sum F_i\int_{T_{ref}}^{T} cp_i\,dT + \frac{X_T F_{T_0}}{(-\nu_T)}(-\Delta H_R) = 0$$

$$\underbrace{F_{tot,0}}_{2F_{T,0}}\,Cp(T_0-T_{ref}) - F_{tot,0}\,Cp(T-T_{ref}) + X_T F_{T,0}(-\Delta H_R) = 0$$

$\cancel{2F_{T,0}\,Cp(T_0-T_{ref})}$

$$2\cancel{F_{T_0}}\,Cp(T_0-T) + X_T\cancel{F_{T_0}}(-\Delta H_R) = 0$$

$$T = \frac{X_T(-\Delta H_R)}{2C_p} + T_0$$ in i integralen!

$$V = F_{T,0} \int_0^{0.5} I(X_T)\, dX_T \; ....$$

(b) om vi istället använder en adiabatisk tank, blir volymen större eller mindre?

$$F_{T,0} - F_T + rV = 0$$

$$X_T F_{T,0} - k C_H^{0.5} C_T V = 0$$

$$V = F_{T_0} \frac{X_T}{k C_H^{0.5} C_T}$$ samma integral som i (a)!

$$V = F_{T,0} \left(I(X = 0.5) \right)$$