

# CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA

## Kemisk reaktionsteknik

### Tentamen i Kemisk reaktionsteknik, grundkurs (K3, Kf3)

onsdagen den 22 januari 1997 kl 08.45-13.45 i ML 14

Said Irandoust är anträffbar för frågor på telefonankn. 3023 och kommer dessutom att vara i tentamenslokalen någon gång mellan 10.00 och 10.30.

---

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 10/2 1997.

---

### Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare (OBS! inga egna anteckningar)

Formelsamling utgiven av institutionen

TEFYMA

Standard Mathematical Tables

βeta Mathematics Handbook

Physics Handbook

Handbook of Chemistry and Physics

---

Lycka till!

Postadress

412 96 GÖTEBORG

Gatuadress

Kemigården 3

Leveransadress

Kemivägen 10

Fax

031-772 30 35

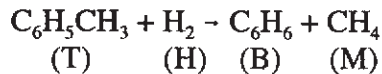
Telefon

031-772 30 30

**Uppgift 1** (ideal tankreaktor)

6 poäng

Väte och toluen (T) i gasfas reagerar i en fluidiserad bädd av fast katalysator ( $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ ) under bildning av bensen och metan enligt reaktionsformeln



Omblandningsbetingelserna i reaktorn är sådana att man kan anse att denna uppför sig som en ideal tankreaktor. Beräkna mängden katalysator vid en produktion av 10 mol bensen/min.

*Processbetingelser*

Inflödets sammansättning (mol %):  
40 %  $\text{H}_2$   
20 % toluen  
40 % inert gas

Temperatur: 600°C (873 K)

Tryck: 10 bar

Reaktionen sker isotermt och isobart.

Reaktionshastighet:

$$r = \frac{1,41 \cdot 10^{-8} p_H p_T}{1 + 1,45 p_B + 1,01 p_T} \text{ kmol / (kg kat sek)}$$

där  $p_H$ ,  $p_T$ ,  $p_B$  är partialtryck (i bar) för väte, toluen och bensen.

Volymflödes hastigheten i inflödesöppningen är 0,4 m<sup>3</sup>/min vid rådande betingelser (600°C, 10 bar).

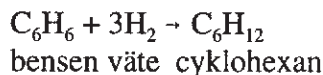
Gasblandningen följer allmänna gaslagen.

Anm. Katalysatormängden blir mycket stor.

**Uppgift 2** (ideal tubreaktor)

6 poäng

Bensen skall hydreras katalytiskt i gasfas i en ideal tubreaktor för att ge cyklohexan enligt reaktionsformeln



Inflödets sammansättning är 90,9 % (molprocent) väte och 9,1 % bensen. Man vill driva reaktionen till 99% omsättningsgrad m a p bensen. Reaktorn innehåller 1 m<sup>3</sup> katalysator.

forts.

Uppgift 2, forts

Vid de aktuella betingelserna kan hastighetsekvationen skrivas

$$r = k p_{\text{H}_2}, \quad \text{där}$$

$$k = 0,145 \text{ mol}/(\text{s bar m}^3 \text{ katalysator})$$

Beräkna vilket totaltryck processen måste arbeta vid för att ge en produktion av 2 mol cyklohexan per sekund.

---

Uppgift 3 (reaktorstabilitet)

6 poäng

Gasfasreaktionen  $A \rightarrow B$  utförs i en kontinuerligt arbetande ideal tankreaktor under adiabatiska betingelser. Reaktionen är ett första ordningens förlopp med avseende på A och hastighetskonstanten kan skrivas

$$k = 5,56 \cdot 10^{13} \exp(-25000/T), \text{ s}^{-1}$$

Beräkna den lägsta halten av A som inflödet kan hålla utan att reaktorn slocknar. Man vet att för ett inflöde med 3,4 volymsprocent A erhålles den maximala adiabatiska temperaturökningen till 300 K. Strömningshastigheten är  $0,075 \text{ m}^3 \text{ (NTP)}/\text{s}$ . Reaktorvolymen är  $0,1 \text{ m}^3$  och gasblandningens densitet är  $4,4 \text{ kg}/\text{m}^3 \text{ (NTP)}$ . Densiteten är oberoende av omsättningsgraden, vilket innebär att man kan anse totala antalet mol i gasblandningen för konstant. Trycket är konstant 1 bar. Maximal tillåten inflödestemperatur är 720 K.

Ledning: Observera att reaktionen sker i gasfas. Balanser som innefattar  $q$  och  $c$  är mindre användbara i detta sammanhang. NTP motsvarar  $0^\circ\text{C}$  och 1 atm (=1,013 bar).

---

Uppgift 4 (beskrivande)

2 poäng

Visa i ett  $x$ - $T$  diagram

- jämviktskurvan för en endoterm jämviktsreaktion.
- driftslinjen för en adiabatiskt arbetande reaktor samt några hastighetskonturer med angivande av det inbördes läget för  $r_1 > r_2 > r_3$ .

Deluppgift b skall avse en endoterm jämviktsreaktion.

---

Uppgift 5 (axiell dispersion, tankseriemodellen)

6 poäng

En gasfasreaktion av första ordningen planeras utförd kontinuerligt i ett tomt, uppvärmt rör av längden 20 m och tvärsnittsytan  $1 \text{ m}^2$ . Längd-bredd-förhållandet hos reaktorn är emellertid inte stort nog för att undvika störningar genom axiell och radiell dispersion som leder till att selektiviteten blir lägre än vad som kan tolereras. För den skull planerar man att fylla reaktorn med sfäriska lika stora fyllkroppar. Man har att välja mellan fyllkroppar med diametern 0,1 m och 0,5 m. Reaktorbäddens porositet med det

Uppgift 5, forts

aktuella packningsmaterialet blir  $\epsilon_B = 0,3$ , dvs den fria gasvolymen är 30% av hela rörvolymen. Porositeten är oberoende av fyllnadsmaterialets diameter. Vid stationära driftsbetingelser är flödehastigheten  $0,3 \text{ m}^3/\text{s}$  räknat vid reaktionstemperaturen. Reaktionen sker vid isoterma betingelser och ger inte upphov till några volymsändringar. Gasen värmes momentant till reaktionstemperaturen vid inträdet i reaktorn. Vid den aktuella reaktionstemperaturen är hastighetskonstanten  $k = 0,01 \text{ s}^{-1}$ . Koncentrationen av reaktanten i inflödet är  $1 \text{ kmol}/\text{m}^3$ . I närvaro av fyllnadsmaterialet kan man bortse från den radiella dispersionen, medan den axiella dispersionen kan beskrivas med sambandet  $Pe_x = 2$ , där  $Pe_x$  är Peclets tal för axiell dispersion.

Beräkna vilket av de två fyllnadsmaterialen som ger den högsta omsättningsgraden. Den stökiometriska koefficienten för reaktanten är  $\nu = -1$ .

---

Uppgift 6 (beskrivande)

4 poäng

- a) Optimal temperaturreglering för att uppnå maximal selektivitet vid konsekutiva reaktioner  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Tre fall bör beaktas, nämligen  $E_1 < E_2$ ,  $E_1 = E_2$ , och  $E_1 > E_2$ , där  $E_1$  och  $E_2$  är aktiveringsenergierna för de båda reaktionerna.
- b) En exoterm jämviktsreaktion utföres i seriekopplade adiabatiska jämviktsskikt med tillförsel av kallt, färskt inflöde mellan skikten. Beskriv med hjälp av ett  $x$ - $T$ -diagram hur omsättningsgraden  $x$  ökar med stigande antal skikt.
-

1997-01-22

Uppgift 0

Första frågan att besvara:

Vad är  $F_T^0$  och  $x_T$

( $F_T^0$ )

Gaslagen  $pV = nRT$

Tillämpad på volymflödet av T

$F_T^0 =$  molflödet av T in (kmol T/min)

$$(P_T^0 q = F_T^0 RT)$$

$$\frac{10 \cdot 0.2 \cdot 0.4}{P_T^0 \cdot q \text{ (m}^3\text{/min)}} = F_T^0 \text{ kmol T/min}$$
$$\frac{0.083 \cdot 873}{R \cdot T}$$

$$F_T^0 = 0.01104 \text{ kmol T/min} \quad (11.04 \text{ mol/min})$$

$$\text{eller } 0.011/60 = 184 \cdot 10^{-4} \text{ kmol T/s}$$

( $x_T$ )

Produktion = 10 mol B/min

$$F_B = F_T^0 x_T$$

$$x_T = F_B / F_T^0 = \frac{10}{11.04} = \underline{0.906}$$

(R)

$$r = \frac{1,41 \cdot 10^{-8} p_H p_T}{(1 + 1,45 p_B + 1,01 p_T)} \quad \frac{\text{kmol}}{\text{kg kat.s}}$$

<p>Inflödet gäller</p> $p_H = p_H^0 - p_T^0 x_T = 2,188$ $p_T = p_T^0 (1 - x_T) = 0,188$ $p_B = p_T^0 x_T = 1,812$ $p_M = p_T^0 x_T$	<p>vidare gäller</p> $p_H^0 = 2 p_T^0$ <p>dos</p> $p_H = p_T^0 (2 - x_T)$
--	---

$$r = \frac{1,41 \cdot 10^{-8} (2 - x_T)(1 - x_T) (p_T^0)^2}{[1 + 1,45 p_T^0 x_T + 1,01 p_T^0 (1 - x_T)]}$$

$$p_T^0 = 10 \cdot 0,2 = 2 \text{ bar}$$

$$r = \frac{5,64 \cdot 10^{-8} (2 - x_T)(1 - x_T)}{3,02 + 0,88 x_T}$$

$$x_T = 0,906$$

$$r = \frac{5,64 \cdot 10^{-8} \cdot 1,094 \cdot 0,094}{3,02 + 0,88 \cdot 0,906} = 0,152 \cdot 10^{-8}$$

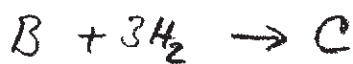
(W)

$$\frac{W}{F_T} = \frac{\Delta x_T}{-v_T r} \quad ; \quad W = \frac{0,906 \cdot 1,84 \cdot 10^{-4}}{0,152 \cdot 10^{-8}}$$

$$W = 10,97 \cdot 10^4 \text{ kg}$$

$$W = 109,7 \text{ ton}$$

Aufgabe 2



$$\frac{V_{kat}}{F_B^0} = \int_0^{0,99} \frac{dx_B}{-v_B \tau}$$

$$p_{H_2} = \frac{n_{H_2}}{\Sigma n} \cdot P$$

$$n_B = n_B^0 (1 - x_B)$$

$$n_{H_2} = n_{H_2}^0 - 3n_B^0 x_B$$

$$n_C = 0 + n_B^0 x_B$$

$$\Sigma n = n_{H_2}^0 + n_B^0 (1 - 3x_B)$$

3,

mit

$$\frac{n_{H_2}^0}{n_B^0} = \frac{90,9}{9,1} \approx 10$$

$$\Sigma n = n_B^0 (11 - 3x_B)$$

$$n_{H_2} = n_B^0 (10 - 3x_B)$$

$$r = k \frac{10 - 3x_B}{11 - 3x_B} P$$

$$\frac{V_{kat}}{F_B^0} = \frac{1}{kP} \int_0^{0,99} \frac{11 - 3x_B}{10 - 3x_B} dx_B$$

$$\frac{V_{kat}}{F_B^0} = \frac{1}{kP} \int_0^{0,99} \left( 1 + \frac{1}{10 - 3x_B} \right) dx_B$$

$$= \frac{1}{kP} \left[ x_B - \frac{1}{3} \ln(10 - 3x_B) \right]_{0,99}$$

$$= \frac{1}{k_p} \cdot 1,11$$

$$P = \frac{1,11 F_B^0}{k V_{kat}}$$

$$F_B^0 = \frac{2}{0,99} = 2,02 \text{ mol B/s}$$

$$P = \frac{1,11 \cdot 2,02}{0,145 \cdot 1} = \underline{\underline{15,5 \text{ bar}}}$$



uppgift 3

Gasfasreaktion i tankreaktor:



$$r = k \cdot c_A$$

$$k = 5,56 \cdot 10^{13} \exp\left(-\frac{25000}{T}\right) \text{ s}^{-1}$$

Beräkna lägsta konc. av A i inlettdet utan att reaktorn stöcknar.

Materialbalans:

$$F_{Af} - F_{Af}(1-X) - r V_r = 0$$

$$F_{Af} X = r V_r = k c_A V_r$$

$$c_A = \frac{F_A}{Q} = \frac{F_{Af}(1-X)}{F_{tot} \cdot \frac{RT}{P}} = (1-X) \frac{F_{Af}}{F_{tot}} \cdot \frac{P}{RT}$$

$$F_{Af} \cdot X = k(1-X) \frac{F_{Af}}{F_{tot}} \cdot \frac{P}{RT} \cdot V_r$$

$$X = \frac{1}{1 + \frac{F_{tot} \cdot RT}{k V_r P}}$$

Reaktionsvärme:

$$Q_r = r V_r (-\Delta H) = F_{Af} X (-\Delta H) \quad \text{Hz}$$

Maximalt värde på  $Q_r$  får för  $X=1$

$$Q_{r, \text{max}} = F_{Af} (-\Delta H)$$

Den maximala reaktionsvärmeeffekten:

$$\frac{Q_r}{Q_{r, \text{max}}} = X$$

$$\frac{Q_r}{Q_{r, \text{max}}} = \frac{1}{1 + \frac{F_{tot} \cdot RT}{k V_r P}}$$

$$n_i = q(\text{NTP}) \cdot \frac{P_0}{RT_0} = \frac{0,075 \cdot 1,013 \cdot 10^5}{8,314 \cdot 273} = 3,347 \text{ mol/s}$$

$$\frac{F_{\text{tot}} \cdot RT}{k \cdot v \cdot P} = \frac{3,347 \cdot 8,314 \cdot T}{5,56 \cdot 10^{13} \exp\left(-\frac{25000}{T}\right) \cdot 0,1 \cdot 10^5} = 5,005 \cdot 10^{17} T \cdot \exp\left(\frac{25000}{T}\right)$$

$$\frac{Q_n}{Q_m} = \frac{1}{1 + 5,005 \cdot 10^{17} \cdot T \cdot \exp\left(\frac{25000}{T}\right)}$$

$\frac{Q_n}{Q_m}$  uppritas som funktion av T.

T (K)	$Q_n/Q_m$
680	0,003
700	0,009
720	0,023
740	0,054
760	0,120
780	0,236
800	0,401
820	0,583
840	0,739
860	0,846
880	0,912
900	0,950
920	0,972
940	0,984

Boilförstärkning:

$$Q_b = F_{\text{tot}} \exp\left(\frac{T - T_b}{T_b}\right) \text{ g/g}$$

Dimensionerast bortfört värme:

$$\frac{Q_f}{Q_{min}} = \frac{F_{tot} c_p (T - T_f)}{F_{Af} (-\Delta H)} = \frac{c_p (T - T_f)}{y_{Af} (-\Delta H)}$$

$y_{Af}$  = molfrakt av A i inflödet.

Det lägsta värdet på  $(y_{Af})_f$  fås när  $Q_f/Q_{min}$  -linjens lutning,

$$\frac{c_p}{(y_{Af})_f (-\Delta H)}$$

så så stor som möjligt.

Av diagrammet  $Q/Q_{min} = f(T)$  framgår att den linje som gäller vid stäckning har störst lutning då  $T_f$  når sitt största värde,  $T_f = 720 \text{ K}$ .

Ur diagrammet fås lutningen  $1/160$ , dvs

$$\frac{c_p}{y_{Af}^{min} (-\Delta H)} = \frac{1}{160}$$

För  $y_{Af} = 0.034$  fås den maximala adiabotiska temperatur-

höjningen  $T - T_f = \Delta T_{max} = 300 \text{ K}$ .

$$\frac{Q_f}{Q_{min}} = 1 \quad \text{för} \quad \Delta T_{max} = 300$$

( $x = 1$ )

$$\frac{c_p}{0.034 (-\Delta H)} = \frac{1}{300}$$

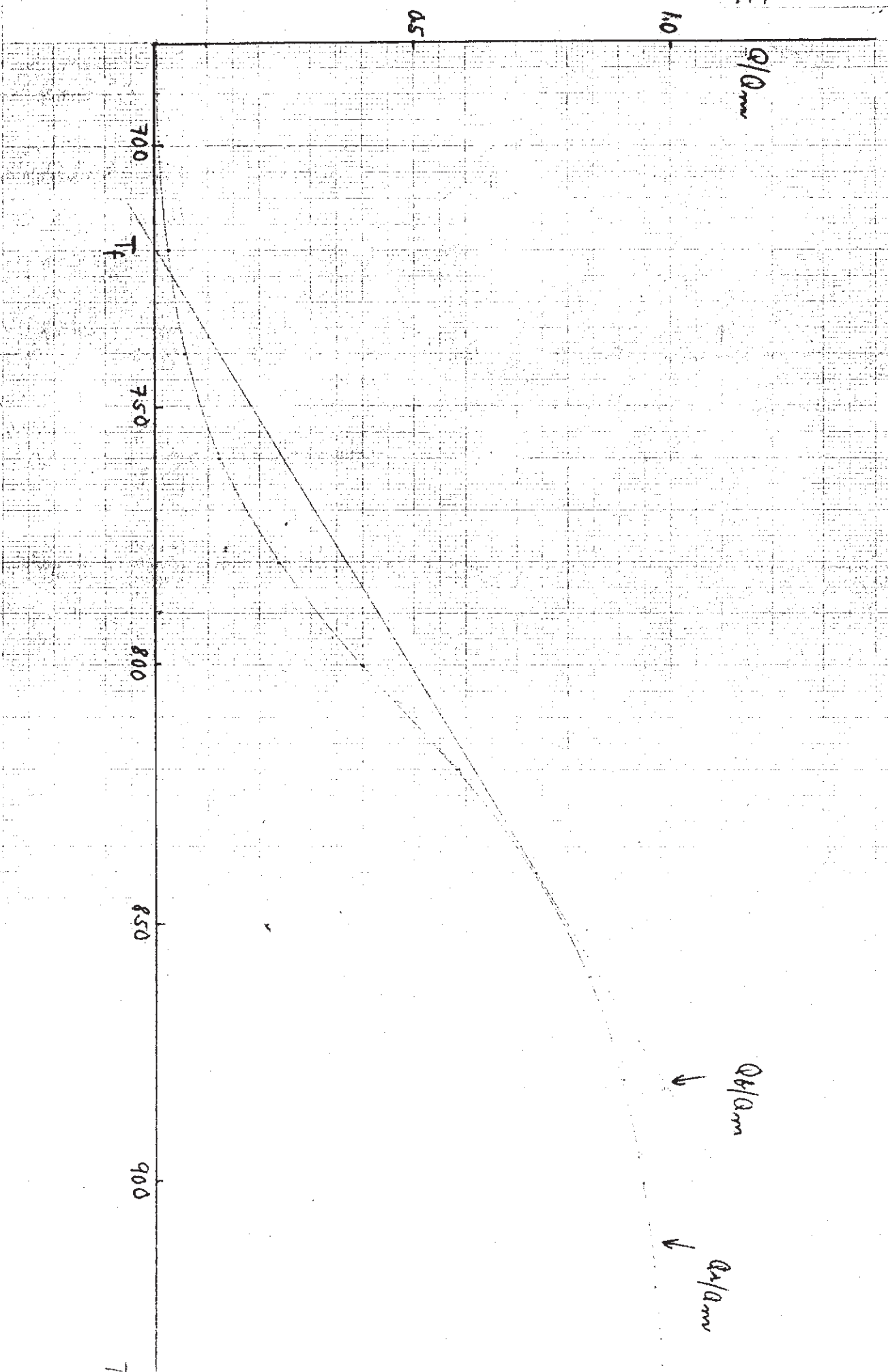
$$y_{Af}^{min} = \frac{160}{300} \cdot 0.034 = 0.018 = \underline{\underline{1.8\%}}$$

$$Q/Q_{ms} = f(T)$$

~~79-01-13~~

Oppg. 17.

7.9



uppgift 5

$$\text{Reaktorvolymen} : 0,3 \cdot 20 = 6 \text{ m}^3$$

Antalet lika stora  
seriekopplade tankar som  
 motsvarar bäddreaktorer:

$$N = \frac{L}{d_p}$$

$$N_1 = \frac{20}{0,1} = 200 \text{ st}$$

$$N_2 = \frac{20}{0,5} = 40 \text{ st}$$

$$c_{\text{out}} = \frac{c_{\text{in}}}{(1 + k\theta)^N}$$

$$c_{\text{in}} = 1 \text{ kmol/m}^3$$

$$k = 0,01 \text{ s}^{-1}$$

$$\tau_1 = \left(\frac{V_r}{N_1}\right) \frac{1}{q} = \frac{6}{200 \cdot 0,3}$$

$$\tau_2 = \frac{6}{40 \cdot 0,3}$$

$$(c_{\text{out}})_1 = \frac{1}{\left(1 + 0,01 \frac{6}{200 \cdot 0,3}\right)^{200}}$$

$$(c_{\text{out}})_2 = \frac{1}{\left(1 + 0,01 \frac{6}{40 \cdot 0,3}\right)^{40}}$$

$$(c_{\text{out}})_1 = \frac{1}{\left(1 + \frac{0,01 \cdot 6}{60}\right)^{200}}$$

$$(c_{\text{out}})_1 = \frac{1}{(1,001)^{200}} = 0,8188$$

$$(c_{\text{out}})_2 = \frac{1}{\frac{(1 + 0,01 \cdot 0,5)^{40}}{1,005}} = 0,8191$$

$$x = 1 - \frac{c_{\text{out}}}{c_{\text{in}}} = 1 - c_{\text{out}}$$

$$x_1 = 18,12 \%$$

$$x_2 = 18,09 \%$$

De små skillnaderna  
bättre, då man  
är liten.