

# **TENTAMEN I KEMISK REAKTIONSTEKNIK**

---

***lördagen den 24 maj 1997 kl 14:15 - 19:15***

---

***Ansvarig lärare: Said Irandoust 031-772 3023 / 031-40 65 35 / 070-753 5023***

***Said Irandoust kommer att besöka tentamenslokalen mellan kl 15:30 och 16:00***

---

***Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 6/6-1997***

---

## **Tillåtna hjälpmedel:**

***Valfri räknare***

***Formelsamling utgiven av institutionen***

***TEFYMA***

***Standard Mathematics Handbook***

***Beta Mathematics Handbook***

***Physics Handbook***

***Handbook of Chemistry and Physics***

## **Ej tillåtna hjälpmedel:**

***Kompendium i KRT och KRT övning***

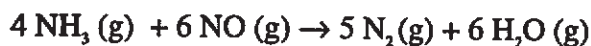
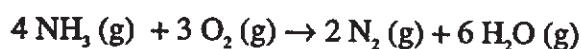
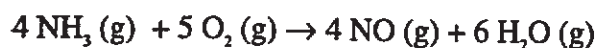
***Lösta exempel***

***Lycka till!***

**Uppgift 1** (materialbalans)

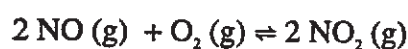
6 poäng

Salpetersyra tillverkas genom katalytisk oxidation av ammoniak vid 850 °C. De huvudsakliga reaktionerna är



I denna reaktor sker en fullständig omsättning m a p ammoniak. Dessutom gäller i reaktorutflödet att 5% av tillförd ammoniak har gett N<sub>2</sub>.

Reaktionsgaserna kyles i ett senare steg varvid följande jämvikt inställer sig (ingen gas kondenserar vid kylningen)



med jämviktskonstanten  $K_p = 10^3 \text{ bar}^{-1}$ .

NO<sub>2</sub> löses sedan i vatten och ger HNO<sub>3</sub>. Beräkna hur många mol luft / mol NH<sub>3</sub> som måste tillföras i det färska inflödet för att 90% av tillförd NH<sub>3</sub> skall ge NO<sub>2</sub>. Trycket i alla delar av anläggningen är 10 bar. Alla procentangivelser är mol-%.

**Uppgift 2** (ideal tubreaktor)

6 poäng

Butadien (B) reagerar i gasfas med eten (E) och ger cyklohexen (C) enligt



Reaktionen sker i en adiabatisk tubreaktor. Inflödet består av en ekvimolekylär blandning av butadien och eten vid 450 °C och 1 atm. Reaktionen är av första ordningen m a p både butadien och eten.

Beräkna den reaktorvolym som krävs för att åstadkomma 10% omsättning m a p butadien då inflödet av butadien är 5 mol/s.

För reaktionen gäller följande data:

$$k = 10^{4.5} e^{-110,000/(RT)} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$\Delta H = -120 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ vid } 450 \text{ °C}$$

$$c_{pB} = 154 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$c_{pE} = 84,4 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$c_{pC} = 249 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Molvärmena antages vara konstanta.

**Uppgift 3** (reaktorstabilitet)

6 poäng

Hastighetsekvationen för hydrering av omättade kolväten vid ett överskott av väte och i närvaro av en fast katalysator kan skrivas

$$r = k c / (1 + K c)^2 \quad \text{mol} / (\text{s m}^3 \text{ katalysator})$$

där  $c$  är koncentrationen av det omättade kolvätet.

Vid en hydrering, som utfördes i en fluidiserad bädd vilken i föreliggande fall kan uppfattas som en ideal isoterm tankreaktor, gäller följande betingelser:

$$q / (k V_{\text{kat}}) = 0,019 \text{ (dimensionslös)}$$

$q$  = volymflödes hastighet

$V_{\text{kat}}$  = volym av katalysator

$$K = 0,2832 \text{ m}^3/\text{mol}$$

Koncentrationen av omättat kolväte i inflödet är  $c_i = 46,6 \text{ mol/m}^3$ . Beräkna vid vilken omsättningsgrad  $m$  a  $p$  kolvätet som man erhåller en instabil driftspunkt.

**Uppgift 4** (uppehållstidsfördelning, icke-ideal reaktor)

5 poäng

Uppehållstidens fördelningen studeras i en kontinuerligt arbetande reaktor. Spårämnet tillförs till inflödet som en mycket kort och ideal puls, varefter spårämnets fördelning mäts i reaktorns utflöde. Tiden noll vid dessa mätningar avser tidpunkten för spårämnets injicering. Följande sammanhörande värden mellan tid och spårämneskoncentration i utflödet erhöles:

<u>tid/min</u>	<u>spårämneskonc./ (mg/l)</u>
0	0
1	0
3	0
5	10
7	10
9	10
11	10
13	0
15	0

Beräkna hur många seriekopplade ideala och lika stora tankreaktorer som denna strömningsbild motsvarar. Vad blir omsättningsgraden för reaktanten A ( $A \rightarrow R$ ,  $r = k c_A$ , där  $k = 0,1 \text{ min}^{-1}$ ) över denna reaktor?

**Uppgift 5** (beskrivande)

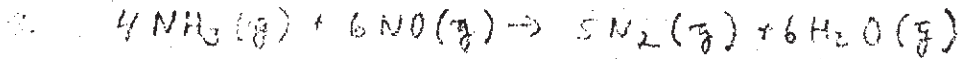
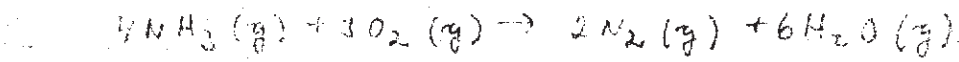
7 poäng

- a) Vilken fysikalisk grund har segregationsmodellen? Beskriv hur denna modell används.
- b) Vad är det för skillnad mellan öppen och sluten mätsträcka vid användning av dispersionsmodellen och vad får den skillnaden för konsekvens vid formuleringen av de ekvationer som beskriver en icke-ideal tubreaktor?
- c) Förklara varför reaktionshastigheten för en exoterm adiabatisk jämviktsprocess går genom ett maximum med ökande omsättningsgrad.
- d) Utgående från reaktanten A fås den önskade produkten B och biprodukten C. Beskriv ett experimentellt sätt för att kunna avgöra om reaktionsmekanismen är parallell ( $A \rightarrow B$  och  $A \rightarrow C$ ) eller konsekutiv ( $A \rightarrow B \rightarrow C$ ).
-

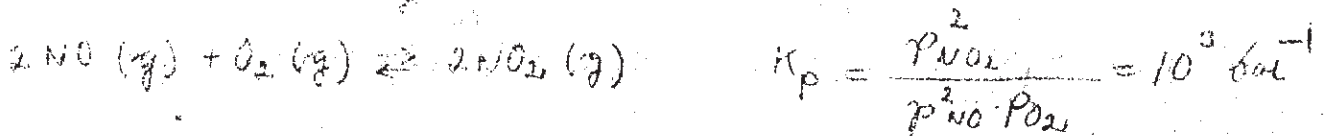
~~1~~ ①

97-05-24

reaktioner i reaktor:



Jämviktsreaktion i kylare:



Bötkonstant: 11 mol  $\text{NH}_3$  och 4 g/m<sup>3</sup> luft per kvadrant i färskluft  
inflöde

$F_{\text{NH}_3} = 4$

$F_{\text{luft}} = 4 \text{ g}$

$F_{\text{O}_2} = 0.21 \cdot 4 \text{ g} = 0.84 \text{ g}$

$F_{\text{N}_2} = 0.79 \cdot 4 \text{ g} = 3.16 \text{ g}$

Molförloshastigheter i reaktantflödet:

$$\begin{cases} F_{\text{NH}_3} = 0 = 4 - 4R_1 - 4R_2 - 4R_3 & (1) \\ F_{\text{O}_2} = 0.84 \text{ g} - 5R_1 - 3R_2 & (2) \\ F_{\text{N}_2} = 3.16 \text{ g} + 2R_2 + 5R_3 & (3) \\ F_{\text{NO}} = 4R_1 - 6R_3 & (4) \\ F_{\text{H}_2\text{O}} = 6(R_1 + R_2 + R_3) & (5) \end{cases}$$

från (1) ges  $R_1 = R_2 + R_3 = 1$

från (5) ges  $F_{\text{H}_2\text{O}} = 6$

5% av luftens  $\text{NH}_3$  ges  $\text{N}_2$

$0.05 \cdot 4 = 2R_2 + 5R_3$

$0.1 = 2R_2 + 5R_3$

(3) ges  $F_{N_2} = 3.16y + 0.1$

15% av tillförd  $NH_3$  ger  $NO$

$$F_{NO} = \frac{0.15 \cdot y}{3.8} = 4R_1 - 6R_3 \quad \text{enligt ekv (4)}$$

$$R_1 = 0.95 + 1.5R_3 \quad (7)$$

av (6) och (7) ins. i ekv (2).

$$F_{O_2} = 0.84y - 5(0.95 + 1.5R_3) - 3(0.05 - 2.5R_3) = 0.84y - 4.90$$

Molförändringstignheter efter bränsle vid jämvikt:

90% av tillförd  $NH_3$  ger  $NO_2$ .

$$F_{NO_2} = 0.9 \cdot y = 3.6$$

$$F_{NO} = 3.8 - 3.6 = 0.2$$

$$F_{O_2} = 0.84y - 4.90 - \frac{3.6}{2} = 0.84y - 6.70$$

$$F_{N_2} = 3.16y + 0.1$$

$$F_{H_2O} = 6$$

$$F_{tot} = 4.0y + 3.2$$

$$P_j = \frac{F_j}{F_{tot}} \cdot P$$

$$K_P = \frac{F_{NO_2}^2}{F_{NO}^2} \cdot \frac{F_{tot}}{F_{O_2}} \cdot \frac{1}{P}$$

$$10^3 = \frac{3.6^2}{0.2^2} \cdot \frac{4y + 3.2}{0.84y - 6.70} \cdot \frac{1}{10}$$

$$\frac{y + 0.8}{0.84y - 6.70} = \frac{10^4}{182.4} = 7.72$$

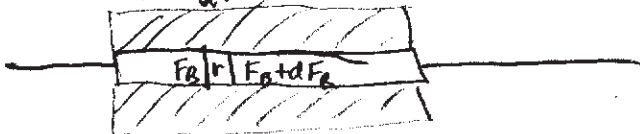
$$y = \underline{\underline{9.58}}$$

970524

"Tavelösning"



$$r = k(T) \cdot c_B \cdot c_E$$

$$\Rightarrow dV$$


Sökt:  $V$  för 10% omväxlingsgrad  
w B.

Adiabatisch tub:  $T = f_1(x) = f_2(z) = f_3(F_B)$

$$r = f_4(T, x) = f_5(x) = F_6(F_B)$$

∴ Sätt  $F_B$  till olika värden, beräkna  $T$  ur V.B., beräkna  $r$ , integrera för att få  $V$ .

$$F_{Bf} = 5 ; F_{Ef} = 5 ; F_{Cf} = 0 \text{ mol/s}$$

$$T_f = 450 + 273,2 \text{ K} = 723,2 \text{ K} = T_{ref} \text{ (ty } \Delta H \text{ är givet vid } 450^\circ\text{C)}$$

$$P = 101325 \text{ Pa}$$

$$x = 0.1 \text{ mol B}$$

$$\Delta H = -120 \cdot 10^3 \text{ J/mol}$$

$$C_{pB} = 154 ; C_{pE} = 84.4 ; C_{pC} = 249 \text{ J/mol K}$$

$$R = 8.314 \text{ J/mol K}$$

Värmebalans (över godtycklig volym)

$$Q_{in} - Q_{out} + Q_r = 0$$

$$\Rightarrow Q_{out} = Q_r \text{ (ty } T_{ref} = T_f \Rightarrow Q_{in} = 0)$$

$$Q_r = (F_{Bf} - F_B) \cdot (-\Delta H)$$

$$Q_{out} = \sum F_i c_{pi} \cdot (T - T_f)$$

$$\Rightarrow T = T_f + Q_r / (F_B \cdot c_{pE} + F_E \cdot c_{pE} + F_C \cdot c_{pC})$$

Materialbalans över  $dV$  var. B.

$$F_B - (F_B + dF_B) - k(T) \cdot C_B \cdot C_E dV = 0$$

$$\Rightarrow dV = \frac{-dF_B}{k(T) C_B C_E}$$

$$\Rightarrow V = - \int_{F_{Bf}}^{F_{But}} \frac{dF_B}{k(T) C_B C_E}$$

$$k(T) = 10^{4.5} \cdot e^{-110000/RT} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$C_B = \frac{P}{RT} \cdot \frac{F_B}{F_{of}} = \frac{P}{RT} \cdot \frac{F_B}{F_B + F_B + (F_{of} - F_B)} = \frac{P}{RT} \cdot \frac{F_B}{F_{of} + F_B}$$

$$C_E = C_B$$

$$I = \frac{1}{k(T) \cdot C_B \cdot C_E}$$

Skapa tabell:  $F_B$   $F_E$   $F_C$   $Q_r$   $T$   $k$   $C_B=C_E$   $I$

Integrera numeriskt ev. t ex. kapetsformeln: se bilaga!



Tentauppgift 970524 nr 2

F_B (mol/s)	F_E (mol/s)	F_C (mol/s)	Qr (J/s)	T (K)	k (m <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	c_B = c_E (mol/m <sup>3</sup> )	I (m <sup>3</sup> mol s <sup>-1</sup> )
5.00	5.00	0.00	0.00E+00	723.2	3.59E-04	8.43	39.27
4.95	4.95	0.05	6.00E+03	728.2	4.07E-04	8.33	35.44
4.90	4.90	0.10	1.20E+04	733.3	4.61E-04	8.23	32.05
4.85	4.85	0.15	1.80E+04	738.3	5.21E-04	8.13	29.04
4.80	4.80	0.20	2.40E+04	743.3	5.88E-04	8.03	26.36
4.75	4.75	0.25	3.00E+04	748.3	6.63E-04	7.93	23.97
4.70	4.70	0.30	3.60E+04	753.3	7.45E-04	7.84	21.83
4.65	4.65	0.35	4.20E+04	758.3	8.37E-04	7.74	19.92
4.60	4.60	0.40	4.80E+04	763.3	9.38E-04	7.65	18.21
4.55	4.55	0.45	5.40E+04	768.3	1.05E-03	7.56	16.67
4.50	4.50	0.50	6.00E+04	773.3	1.17E-03	7.47	15.29

$$0.05 * (I_1/2 + \text{sum}(I_2; I_{10}) + I_{11}/2) =$$

12.54  
m<sup>3</sup>

% Tenta 970524 Uppgift 2

%  
global B E C Ff Tf cp P R DH

B=1; % Index butadien  
E=2; % Index eten  
C=3; % Index cyklohexan

Ff(B)=5; % Inflöde butadien mol/s  
Ff(E)=5; % Inflöde eten mol/s  
Ff(C)=0; % Inflöde cyklohexan mol/s  
Tf=450+273.2; % Temp. inflöde K (=referenstemp.)  
P=101325; % Totaltryck Pa  
x=0.1; % Omsättning butadien  
DH=-120e3; % Reaktionsentalpi vid 450 C, J/mol  
cp(B)=154; % Molvärme butadien J/molK  
cp(E)=84.4; % Molvärme eten J/molK  
cp(C)=249; % Molvärme cyklohexan J/molK  
R=8.314; % Gaskonstanten J/molK

N=10; % Antal steg i integrering

F=zeros(N+1,3);  
F(:,B)=[Ff(B)\*[1:-1/N\*x:1-x]]';  
F(:,E)=F(:,B);  
F(:,C)=Ff(B)-F(:,B);

% Värmebalans  $Q_{in} - Q_{out} + Q_r = 0$   
%  
%  $\Rightarrow Q_{out} = Q_r$  (ty  $T_{ref} = T_f \Rightarrow Q_{in} = 0$ )

$Q_r = (Ff(B) - F(:,B)) * (-DH);$

%  $Q_{out} = (\text{summa } F_i c_{pi}) * (T - T_f)$

$T = T_f + Q_r / (F * c_p);$

% Materialbalans  $FB - (FB + dFB) - k(T) c_B c_E dV = 0$   
%  
%  $\Rightarrow dV = -dFB / k(T) c_B c_E$

$k = 10^{4.5} * \exp(-110e3 ./ (R * T));$

$c_B = P ./ (R * T) .* F(:,B) ./ (2 * Ff(B) - F(:,B));$   
 $c_E = c_B;$

$I = 1 ./ (k .* c_B .* c_E);$

$V_{trap} = -\text{trapz}(F(:,B), I);$

$V_{int} = -\text{quad8}('f9705242', Ff(B), Ff(B) * (1-x), 1e-8, 1);$

$\Rightarrow V = 3,5622 \text{ m}^3$

$\Rightarrow V = 3,5605 \text{ m}^3$

```
function f=f9705242(FB)
```

```
global B E C Ff Tf cp P R DH
```

```
N=length(FB);
```

```
F=zeros(N,3);
```

```
F(:,B)=FB';
```

```
F(:,E)=F(:,B);
```

```
F(:,C)=Ff(B)-F(:,B);
```

```
% Värmebalans Qin - Qut + Qr = 0
```

```
%
```

```
% => Qut = Qr (ty Tref = Tf => Qin = 0)
```

```
Qr=(Ff(B)-F(:,B))*(-DH);
```

```
% Qut = (summa Fi cpi) * (T-Tf)
```

```
T=Tf+Qr./(F*cp');
```

```
% Materialbalans FB - (FB+dFB) - k(T)cBcE dV = 0
```

```
%
```

```
% => dV = - dFB/k(T)cBcE
```

```
k=10^4.5*exp(-110e3./(R*T));
```

```
cB=P./(R*T).*F(:,B)./(2*Ff(B)-F(:,B));
```

```
cE=cB;
```

```
f=1./(k.*cB.*cE);
```

tenta 970524

Reak: Omätt kol. +  $H_2 \rightarrow$  mätt. kol.

$$r = \frac{kC}{(1+Kc)^2} \quad (C = \text{omätt})$$

mol/s m<sup>3</sup>kat

1) Givet:  $\frac{q}{kV_{\text{kat}}} = 0,019$ ,  $K = 0,2832 \text{ m}^3/\text{mol}$

2)  $C_f = 46,6 \text{ mol/m}^3$ , reaktor anses som  
isotermiskt ideal tank

Sökt: instabil driftpunkt,  $X^{\text{instabil}}$

MB map omättat över tank

1)  $F_{Af} - F_{Af}(1-x) - rV_{\text{kat}} = 0 \rightarrow$

2)  $M_b = F_{Af}x = qC_f x$

3)  $M_r = rV_{\text{kat}} = \frac{kC}{(1+Kc)^2} V_{\text{kat}} = \frac{kV_{\text{kat}}C_f(1-x)}{(1+Kc_f(1-x))^2}$

eller dela  $M_b = M_r$  m.  $k \cdot V_{\text{kat}} \rightarrow$

$$M_b^* = \frac{q}{kV_{\text{kat}}} C_f x = 0,019 \cdot 46,6 \cdot x$$

$$M_r^* = \frac{C_f(1-x)}{(1+Kc_f(1-x))^2} = \frac{46,6(1-x)}{(1+0,2832 \cdot 46,6(1-x))^2}$$

Driftpunkter för då  $M_b^* = M_r^*$

Plotta  $M_b^*$  &  $M_r^*$  & läs av

Skärningarna  $\Rightarrow$

$$x_1 = 0.39$$

$$x_2 = 0.80$$

$$x_3 = 0.95$$

Löst i följande  $x_1 = 0.394$

$$x_2 = 0.807$$

$$x_3 = 0.951$$

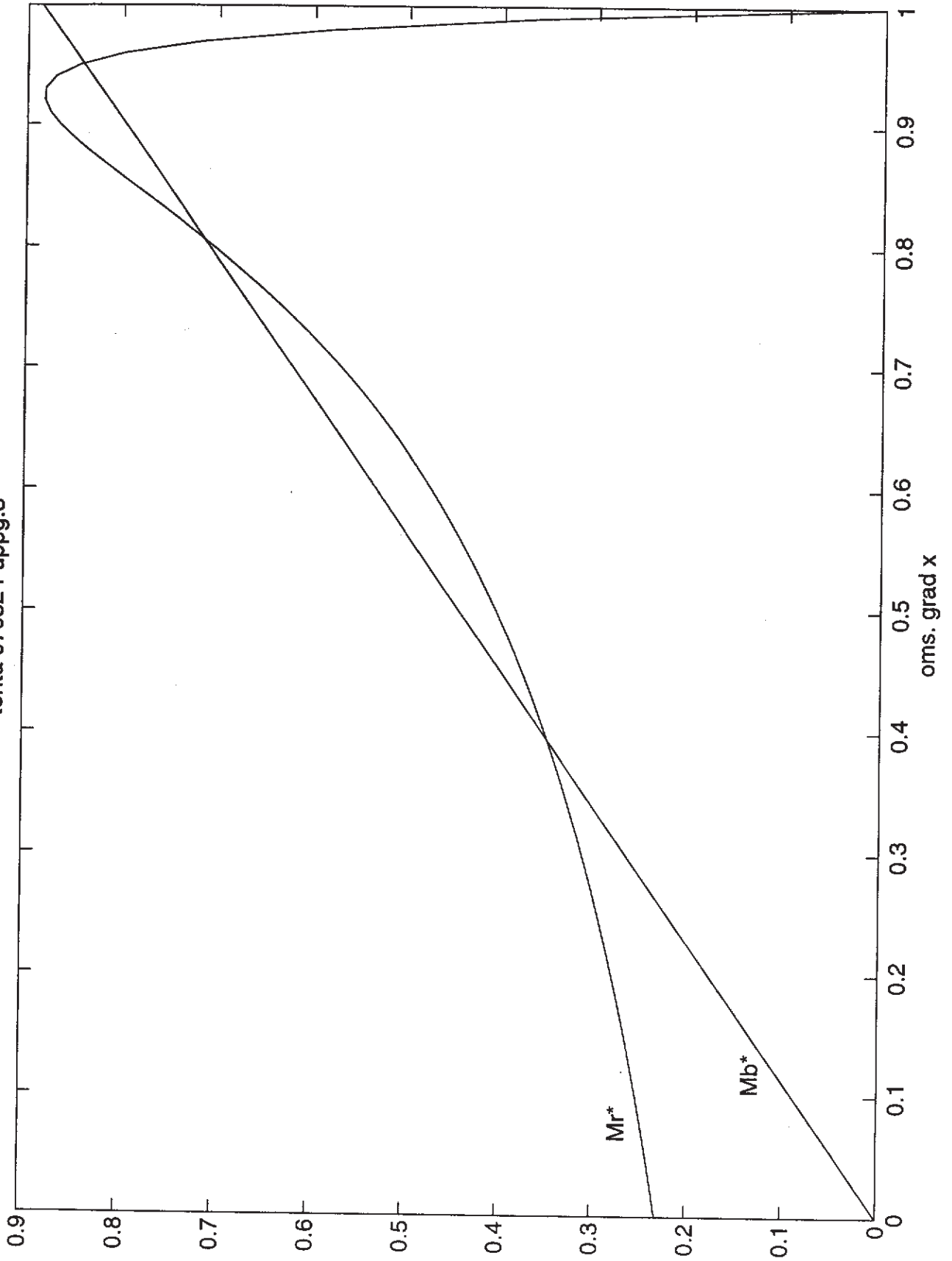
Stabilitet: En drifpunkt är instabil

$$\text{då } \frac{dM_r}{dx} > \frac{dM_b}{dx} \text{ dvs.}$$

då lutningen för  $M_r$  är större  
än lutningen för  $M_b \Rightarrow$

$$x_2 = \underline{0.807} \text{ är instabil}$$

tenta 970524 uppg.3



p4  
% Bestämning av antal tankar:  
t=[1 3 5 7 9 11 13 15]';  
c=[0 0 10 10 10 10 0 0]';  
c\_integral=trapz(t,c);  
e=c./c\_integral;  
t\_medel=trapz(t,t.\*e)

t\_medel =

8

sigma\_2=(trapz(t,t.^2.\*e))-t\_medel^2

sigma\_2 =

5

N=t\_medel^2/sigma\_2

N =

12.8000

% Bestämning av oms. för en första ordningens reaktion

k=.1;

x=1-1/((1+k\*t\_medel/N)^N)

x =

0.5398

-2)

2)