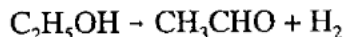


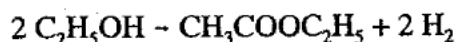
Uppgift 1 (materialbalans)

5 poäng

Framställning av acetaldehyd (CH_3CHO) genom katalytisk dehydrering av etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) sker enligt reaktionsformeln



Etanolen reagerar även under bildning av etylacetat ($\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$) genom sidoreaktionen



Vid temperaturen 330°C i reaktorn och med koppar(II)nitrat som katalysator reagerar 85% av etanolen, varvid erhålles en blandning av etanol, acetaldehyd, etylacetat och väte. Viktsförhållandet mellan acetaldehyd och etylacetat i denna blandning är 7,3:1. Gasen nedkyls i en kolonn, varifrån tre kondensat uttages, nämligen acetaldehyd som innehåller 5 vikt % etanol, ren etylacetat samt ren etanol, vilken återförs till reaktorinflödet. Det färska inflödet består av ren etanol.

Beräkna

- Förhållandet mellan recirkulerad och tillförd färsk etanol.
- Etanolmängden som tillförs reaktorn räknat per 100 kg framställd etanolhaltig acetaldehyd.

Uppgift 2 (tankreaktor, optimering)

5 poäng

En anläggning för tillverkning av produkten R ur reaktanten A med hjälp av reaktionen $\text{A} - \text{R}$ består av en ideal tankreaktor och en i serie med reaktorn kopplad separator, som separerar produkten R från oreagerad reaktant A. Separationen sker fullständigt och oreagerad A återföres till reaktorns inflöde. Det färska inflödet består enbart av A (inget lösningsmedel) och koncentrationen av A i detta flöde uppgår till 1 kmol/m^3 . Kostnaden för A är 1 USD/kmol. Koncentrationen av A i återflödet är också 1 kmol/m^3 . Drifkostnaden för reaktorn är $8 \text{ USD} + 0,01 \text{ USD per m}^3$ reaktorvolym och drifkostnaden för separatoren är $8 \text{ USD} + 0,1 \text{ USD/m}^3$ ingående flöde till separatoren.

Man önskar framställa 100 kmol R/h. Vad blir den lägsta kostnaden för framställning av 100 kmol R/h? Densiteten i flödena är oberoende av sammansättningen.

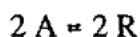
Hastighetsekvationen är $r = k \cdot c_A \cdot c_R$.

Hastighetskonstanten är $k = 0,1 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{h}}$.

Uppgift 3 (tubreaktor)

5 poäng

I en industriell anläggning genomföres en heterogen katalytisk gasfasprocess vid atmosfärstryck i tre parallella lika stora rörreaktorer, som kan betraktas som ideala. Det elementära förloppet vid den katalytiska reaktionen kan skrivas



Inflödet till reaktorerna utgörs av en blandning av reaktanten A och en inert förening S, som inte påverkar reaktionsförloppet men som har en skyddande inverkan på katalysatorn genom att minska deaktiveringen av denna. En av de tre reaktorerna var installerad senare än de övriga för att höja produktionskapaciteten föranledd av en tillfällig ökad efterfrågan på produkten R. Efter en relativt kort driftstid fann man att det använda konstruktionsmaterialet i den tredje reaktorn ej svarade mot specifikationerna. Reaktorn måste tagas ur drift och kunde ej repareras. Inflödet till de två kvarvarande reaktorerna höjdes med 50% för att i någon mån kompensera för den minskade produktionskapaciteten. Vid normal drift med tre reaktorer fick reaktionen förlöpa till 75% utbyte, dvs till 75% av den omsättningsgrad som erhålles vid jämvikt. Hur stort blir utbytet med de två återstående reaktorerna då flödes hastigheten höjts med 50%? Vid beräkningen förutsättes att temperaturen och katalysatorns aktivitet är konstanta över hela katalysatorskikten. Vid de aktuella driftsbetingelserna gäller jämviktssambandet

$$K_p = p_R^2 / p_A^2 = 4$$

Nettohastigheten för förloppet kan skrivas

$$r = k_1 p_A^2 - k_{-1} p_R^2 = k_1 (p_A^2 - p_R^2 / K_p)$$

Uppgift 4 (reaktorstabilitet)

5 poäng

En första ordningens irreversibel reaktion ($A \rightarrow B$) i vätskefas skall genomföras kontinuerligt i en ideal tankreaktor försedd med kylare.

Reaktionsbetingelserna är följande:

Reaktorns volym:	10 m ³
Reaktantkoncentration i inflödet:	5 kmol m ⁻³
Flödes hastighet:	10 ⁻² m ³ s ⁻¹
Reaktionsentalpi:	-20 kJ mol ⁻¹ (oberoende av temp.)
Hastighetskonstant:	10 ¹³ exp(-12000/T), s ⁻¹
Lösningens densitet:	850 kg m ⁻³ (oberoende av temp. och omsättningsgrad)
Värmekapacitivet för lösningen:	2200 J kg ⁻¹ K ⁻¹ (oberoende av temp. och omsättningsgrad)
Produkten av kyltan (A) och värmegenomgångskoefficienten (U):	9000 J s ⁻¹ K ⁻¹
Kylmediets temperatur (konstant):	310 K
Inflödets temperatur:	310 K

forts.

Uppgift 4, forts

För det utvecklade reaktionsvärmets (Q_r) beroende av reaktortemperaturen under ovanstående betingelser gäller följande sammanhörande värden (se tabellen) vid stationära betingelser:

T/K	$Q_r \cdot 10^{-5}$ s/J
290	0,1
300	0,4
310	1,4
320	3,4
330	6,1
340	8,2
350	9,3

Beräkna reaktorns driftstemperatur och angiv omsättningsgraden i denna. Är driftpunkten stabil?

Uppgift 5 (uppehållstidsfördelning)

5 poäng

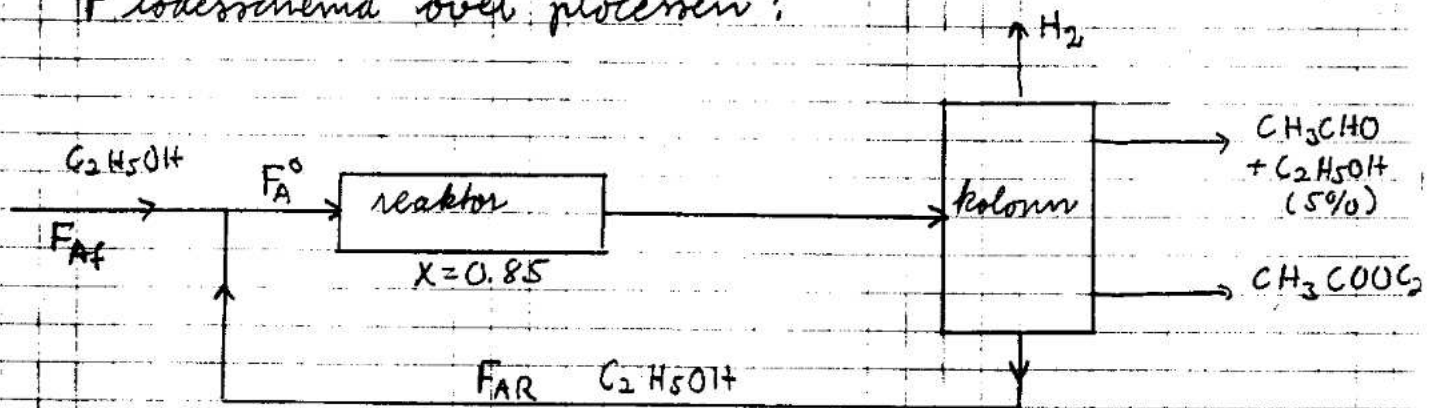
Man vill bestämma blandningseffektiviteten i en reaktorkaskad bestående av sex lika stora seriekopplade reaktorer försedda med omrörare. Vid tiden $t = 0$ tillsättes en puls av syralösning i inflödet till den första reaktorn. Syrakoncentrationen i utflödet från den sista reaktorn mäts med tio minuters mellanrum. Sammanhörande värden på tid och syrakoncentration finns i Tabell 1.

Tabell 1 Syrakoncentrationen i utflödet från den sjätte reaktorn

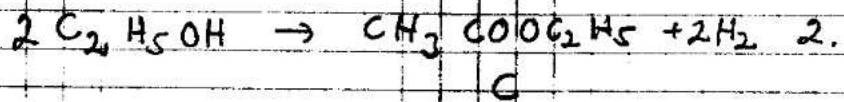
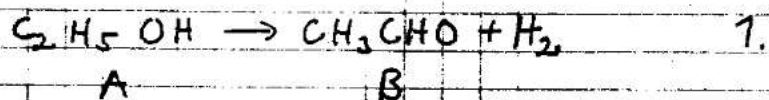
tid/ min.	syrakoncentration/ (kg/m ³)
0	0
10	1,63
20	3,96
30	3,00
40	1,39
50	0,51
60	0,10
70	0

Beräkna hur många seriekopplade ideala tankreaktorer som reaktorkaskaden motsvarar.

Flödeschema över processen:



Reaktioner:

Reaktionsbas: F kg etanolhaltig acetaldehyd.Molfördeshastigheter vid omsättningsgraden X i reaktorn:

$$F_A = F_{Af} - \xi_1 - 2\xi_2$$

 $\xi_1 = \text{mol omsatt vid reaktion 1}$

$$\text{och } F_A = F_{Af} - F_A^0 \cdot X$$

 $\xi_2 = \text{mol omsatt vid reaktion 2}$

$$F_B = \xi_1$$

$$F_C = \xi_2$$

$$F_{Af} = F_A + F_B + 2F_C$$

Vidare gäller:

$$F_A = \frac{0,05F}{M_A}$$

$$M_A = 46,1 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

$$F_B = \frac{0,95F}{M_B}$$

$$M_B = 44,06 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

$$M_C = 88,1 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

$$\frac{F_B \cdot M_B}{F_C \cdot M_C} = 7,3 \quad \Rightarrow \quad F_C = \frac{0,95F}{M_C \cdot 7,3}$$

$$F_{Af} = \frac{0,05F}{M_A} + \frac{0,95F}{M_B} + 2 \cdot \frac{0,95F}{7,3M_C}$$

$$F_{Af} = 2,560 \cdot F$$

$$F_A^0 \times = F_{Af} - F_A = \frac{2.560F}{100} - \frac{5F}{100 \text{ MA}} = \frac{2.452}{100} F$$

$$F_A^0 = \frac{2.452}{100 \cdot 0.85} F = \frac{2.885}{100} F$$

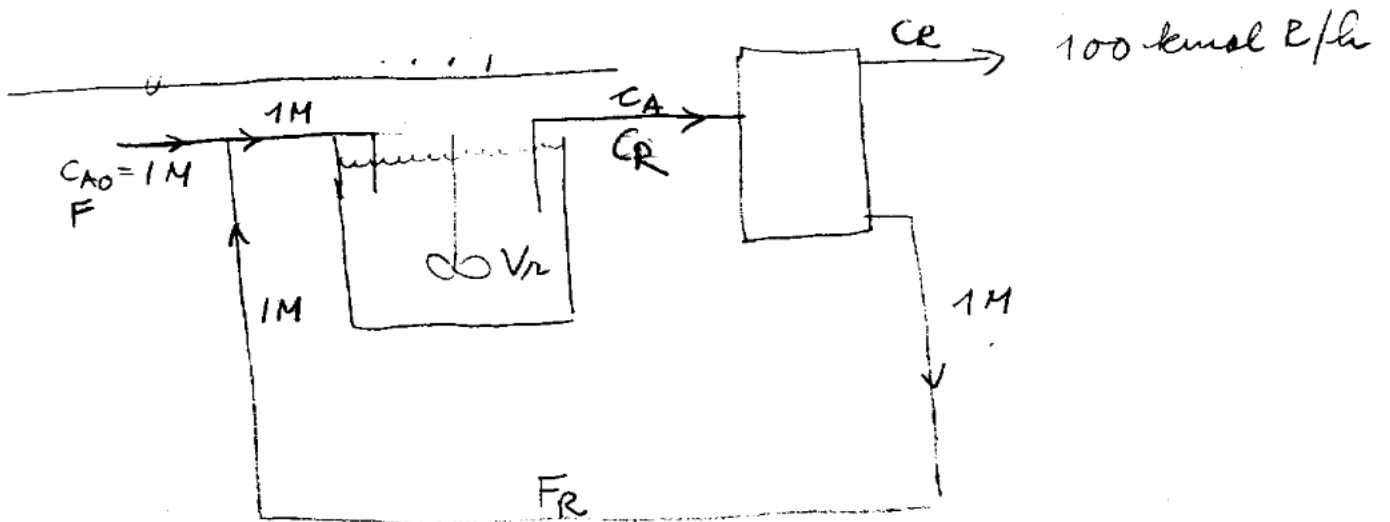
$$F_{AR} = F_A^0 - F_{Af} = \frac{0.325}{100} F$$

$$\frac{F_{AR}}{F_{Af}} = \frac{0.325}{2.560} = \frac{1}{7.88}$$

$$F = 100 \text{ kg}$$

$$F_A^0 = 2.885 \text{ kmol} = 2.885 \cdot 46.1 = \underline{\underline{133.0 \text{ kg}}}$$

u 289. (2) 1998-01-16



$A \rightarrow R$

$$C_E = C_{A0} - C_A = 1 - C_A$$

utflöde av R = friskt inflöde av A : $100 = C_{A0} \cdot F$

men $c_{A0} = 1$ ger $F = 100 \text{ m}^3/\text{h}$

4,

Balans av A över reaktorn

$$(100 + F_R) \cdot 1 - (100 + F_R) c_A - 0,1 c_A (1 - c_A) V_R = 0$$

Balans av A över separatorn

$$(100 + F_R) c_A = F_R \cdot 1$$

Kostnad: C (per timme) USD/h

$$C = \underset{\text{råvara}}{100} + 8 + 0,01 V_R + 8 + 0,1 (100 + F_R)$$

$$= 100 + 16 + 10 + 0,01 V_R + 0,1 F_R$$

$$= 126 + 0,01 V_R + 0,1 F_R$$

Separatorbalansen ger

$$c_A = \frac{F_R}{100 + F_R}$$

och/eller

$$F_R = \frac{100 c_A}{1 - c_A}$$

Reaktorckv. ger

$$(100 + F_R)(1 - c_A) = 0,1 c_A (1 - c_A) V_R$$

$$V_R = \frac{100 + F_R}{0,1 c_A} = \frac{1000}{c_A (1 - c_A)}$$

$$C = 126 + 0,01 \frac{1000}{c_A(1-c_A)} + 0,1 \frac{100c_A}{1-c_A}$$

$$C = 126 + \frac{10}{c_A(1-c_A)} + \frac{10c_A}{1-c_A}$$

$$C = 126 + \frac{10 + 10c_A^2}{c_A(1-c_A)}$$

$$\frac{dc}{dc_A} = \frac{c_A(1-c_A)20c_A - (10 + 10c_A^2)(1-2c_A)}{[c_A(1-c_A)]^2}$$

$$dc/dc_A = 0 \text{ ger}$$

$$2c_A^2(1-c_A) = (1+c_A^2)(1-2c_A)$$

Prövning ger

(givet var $c_A \approx 0,4$)

c_A	VL	HL
0,4	0,192	0,232
0,42	0,204	0,188
0,41	0,198	0,210

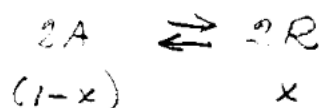
Rätt lösning $c_A = 0,414$

$$C = 126 + \frac{10}{0,411 \cdot 0,59} + \frac{10 \cdot 0,41}{0,59} = \underline{\underline{174,4 \text{ dollar/t}}}$$

(Obs! r_{max} erhålls för $c_A = 0,5M$)

mppg. (3) 1998-01-16

Bas: 1 mol A



$$\Sigma \text{ mol} = 1 + S$$

Med inert gas S: S mol per 1 mol A i inflödet

$$r = k_1 p_A^2 - k_{-1} p_R = k_1 (p_A^2 - p_R^2 / K_p)$$

$$r = k_1 (p_A^2 - p_R^2 / K_p)$$

$$p_A = (1-x)/(1+S)$$

$$p_R = x/(1+S)$$

$$r = \frac{k_1}{(1+S)^2} \left\{ (1-x)^2 - \frac{x^2}{K_p} \right\}$$

$$r = \frac{k_1}{(1+S)^2} \left(1-x + \frac{1}{2}x \right) \left(1-x - \frac{1}{2}x \right)$$

(3)

$$r = \frac{k_1}{(1+S)^2} (1-0,5x)(1-1,5x)$$

$$\frac{W}{F_A} = \frac{(1+S)^2}{k_1} \int_0^x \frac{dx'}{(1-0,5x')(1-1,5x')}$$

Med hjälp av tabell för standardintegraler erhålls

$$\frac{W}{F_A} = \frac{(1+S)^2}{k_1} \frac{1}{-0,5-1,5} \ln \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

$$\frac{W}{F_A} = \frac{(1+S)^2}{k_1} \ln \frac{(1-0,5x)}{1-1,5x} \quad \underline{\text{ekv. 1}}$$

Beräkning av x vid 75% utbyte

$$p_2^2 / p_A^2 = 4 \text{ ger } p_R / p_A = 2$$

Vid 100% utbyte, dvs jämvikt erhålls

$$\frac{x}{1-x} = 2$$

$$x = 2/3$$

$$75\% \text{ utbyte ger } x = \frac{3}{4} \cdot \frac{2}{3} = 0,5$$

Se ekv. (1)

$$\frac{W}{F_A} = A \ln \frac{(1-0,5x)}{(1-1,5x)}$$

Kärl; sator mängden är densamma före och efter
och värdet av F_A till 1,5.

(4)

Vid normaldrift med tre reaktorer
gäller för varje reaktor:

$$W = F_A \cdot A \cdot \ln 3$$

Vid drift av två reaktorer med ökat flöde
gäller för varje reaktor:

$$W = 1,5 F_A \cdot A \cdot \ln \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

För beräkning av x gäller

$$\ln 3 = 1,5 \ln \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

eller

$$\log 3 = 1,5 \log \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

$$\frac{0,4771}{1,5} = 0,317$$

$$\log \frac{1-0,5x}{1-1,5x} = 0,317$$

$$\frac{1-0,5x}{1-1,5x} = 2,08$$

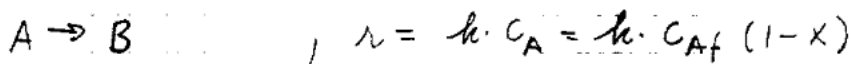
$$x = 0,41$$

$$\text{utbytet} = \frac{0,41 \cdot 3}{2} = \underline{\underline{0,61}} \text{ - dvs } 61\%$$

Uppgift 4

1998-01-16

Extern irreversibel reaktion i en icke-adiabatisk ideal tankreaktor.



Materialbalans m.a.p. A:

$$q C_{Af} - q C_{Af} (1-x) - r V_R = 0$$

$$q C_{Af} \cdot x = r V_R = k \cdot C_{Af} \cdot (1-x) \cdot V_R$$

$$x = k (1-x) \cdot \frac{V_R}{q} = kT (1-x), \quad T = \frac{V_R}{q}$$

$$x = \frac{kT}{1+kT}$$

Värmebalans:

Standardtemp = inflödestemp. = T_f

Reaktionsvärme per tidsenhet:

$$Q_R(T) = r V_R (-\Delta H) = k \cdot C_{Af} (1-x) V_R (-\Delta H) = q C_{Af} \cdot x (-\Delta H) = q \cdot C_{Af} \cdot \frac{kT}{1+kT} (-\Delta H) \quad 7/2$$

Bortfört värme per tidsenhet:

$$Q_f(T) = q \rho C_p (T - T_f) + UA(T - T_K) = (q \rho C_p + UA)T - q \rho C_p T_f - UA T_K \quad 7/2$$

U = värmegenomgångskoefficient

A = värmeyta

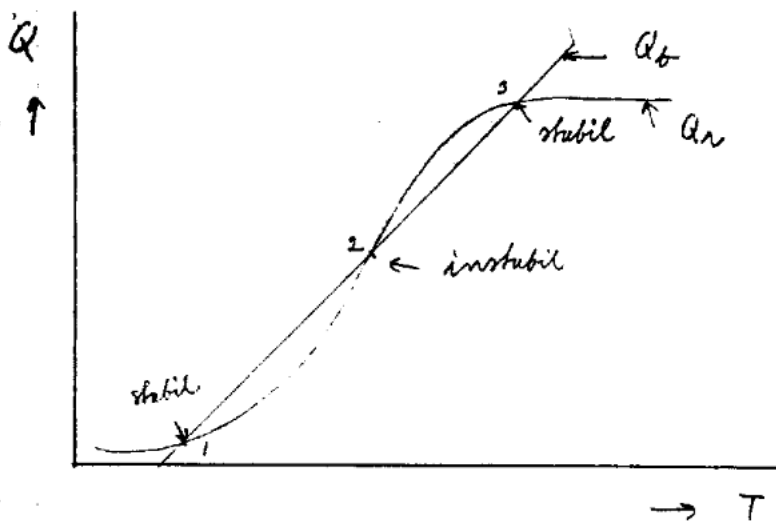
T_K = kylmediets temperatur (konstant)

$\Phi_{Tm,K} = T - T_K$ = logaritmsk medeltemperaturdifferens över värmeytan

Vid stationär drift:

$$Q_R(T) = Q_f(T)$$

4)



Stationära tillstånden 1 och 3 är stabila, dvs om det reglerade systemet utsätts för en störning (ex. liten ändring av temp) så återgår det till starttillståndet 1 eller 3. Tillståndet 2 är instabilt, systemet återgår ej efter en störning utan skenar iväg.

Villkor för stabil drift:

$$1. UA + q \cdot \rho \cdot c_p (2 + kT) > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T} \right)_c = \left(\frac{dQ_r}{dT} \right)_s \cdot \frac{1}{1-X} \quad (17.57)$$

$$2. UA + q \cdot \rho \cdot c_p > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T} \right)_c (1-X) = \left(\frac{dQ_r}{dT} \right)_s \quad (17.58)$$

index "s" anger stationär driftpunkt.

$$\frac{dQ_r}{dT_s} = \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T_s} \right)_X + \left(\frac{\partial Q_r}{\partial X} \right)_T \left(\frac{dX}{dT_s} \right)$$

Villkor 2 nödvändigt för både adiabatiska och icke-adiabatiska reaktorer.

Villkor 1 tillkommer för icke-adiabatiska reaktorer.

E nklare stabilitetsvillkor (Tunnregel):

$$\Delta T_c > \Delta T_{ov} \quad (17.70)$$

$$\Delta T_c = \frac{RT^2}{E} = \text{kritisk temperaturöverskottning.}$$

Tunnregeln gäller under förutsättning att $UA \gg q \rho c_p$, dvs huvuddelen av det tillförda värmnet avlägsnas genom strömningen.

4) 1. Bestämning av driftpunkten.

$$Q_r(T) = q \cdot c_{Af}(-\Delta H) \cdot \frac{kT}{1+kT}$$

$$Q_r(T) = 10^{-2} \cdot 5 \cdot 10^3 \cdot 20 \cdot 10^3 \cdot \frac{kT}{1+kT} = 10^6 \frac{kT}{1+kT} \quad \text{J/s}$$

$$T = \frac{V_2}{q} = \frac{10}{10^2} = 10^3 \text{ s}$$

$$k = 10^{13} \exp(-12000/T) \text{ s}^{-1}$$

T K	$k \cdot 10^5$ s^{-1}	$\frac{kT}{1+kT}$	$Q_r(T) \cdot 10^{-5}$ J/s
290	1.07	0.011	0.11
300	4.25	0.041	0.41
310	15.44	0.134	1.34
320	51.76	0.341	3.41
330	161.24	0.617	6.17
340	469.85	0.825	8.25
350	1287.96	0.928	9.28

Tabellens värden ger kurvan $Q_r = f(T)$ (se diagram)

$$Q_k(T) = q \rho c_p (T - T_f) + UA(T - T_k)$$

$$Q_k(T) = 10^{-2} \cdot 850 \cdot 2200(T - 310) + 9000(T - 310) \quad \text{J/s}$$

$$Q_k(T) = 18.7 \cdot 10^3(T - 310) + 9 \cdot 10^3(T - 310) = 27.7 \cdot 10^3(T - 310)$$

$$Q_k(T) = 27.7 \cdot 10^3 T - 85.87 \cdot 10^5$$

$$T = 310 \Rightarrow Q_k = 0$$

$$T = 345 \quad Q_k = 9.695 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

Den röda linjen $Q_k = f(T)$ lägges in i diagrammet
 Skärningen mellan linjen och kurvan ger driftpunkten
 Drifttemperatur: T = 339 K

4)

$$Q_n = Q_f = 27.7 \cdot 10^3 \cdot 339 - 85.87 \cdot 10^5 = 8.03 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

$$x = \frac{Q_n}{q \cdot C_{Af} (-\Delta H)}$$

$$x = \frac{8.03 \cdot 10^5}{10^2 \cdot 5 \cdot 10^3 \cdot 20 \cdot 10^3} = \underline{\underline{0.803}}$$

2. Analys av driftpunktens stabilitet.

$$Q_n = q \cdot C_{Af} (-\Delta H) \cdot X$$

$$Q_n = k \cdot C_{Af} (1-X) V_2 (-\Delta H)$$

$$\left(\frac{dQ_n}{dT} \right)_s = q \cdot C_{Af} (-\Delta H) \frac{dx}{dT}$$

$$x = \frac{kT}{1+kT}$$

$$k = k_0 \cdot e^{-E/RT^2}; \quad \frac{dk}{dT} = k_0 \cdot \frac{E}{RT^2} \cdot e^{-E/RT} = k \cdot \frac{E}{RT^2}$$

$$\frac{dx}{dT} = \frac{T}{1+kT} \frac{dk}{dT} - \frac{kT}{(1+kT)^2} \cdot T \cdot \frac{dk}{dT}$$

$$\frac{dx}{dT} = \frac{E}{RT^2} \left(\frac{kT}{1+kT} - \frac{(kT)^2}{(1+kT)^2} \right) = \frac{E}{RT^2} X(1-X)$$

$$\left(\frac{dQ_n}{dT} \right)_s = q \cdot C_{Af} (-\Delta H) \cdot X(1-X) \cdot \frac{E}{RT^2} = Q_n \cdot (1-X) \cdot \frac{E}{RT^2}$$

$$\left(\frac{\partial Q_n}{\partial T} \right)_x = Q_n \cdot \frac{E}{RT^2} \quad \left(\frac{E}{R} = 12000 \right)$$

$$\left(\frac{dQ_n}{dT} \right)_s = \frac{8.03 \cdot 10^5 \cdot 12000 \cdot 0.197}{339^2} = 16.52 \cdot 10^3 \text{ J/sK}$$

$$\left(\frac{\partial Q_n}{\partial T} \right)_x = \frac{8.03 \cdot 10^5 \cdot 12000}{339^2} = 83.85 \cdot 10^3 \text{ J/sK}$$

Stabilitetsvillkor:

$$UA + q \rho C_p (2 + kT) > \left(\frac{\partial Q_n}{\partial T} \right)_x$$

$$k_{339} = 4.234 \cdot 10^{-3}$$

$$4) UA + q_{scp}(2 + kT) = 9 \cdot 10^3 + 18.7 \cdot 10^3 (2 + 4.234 \cdot 10^{-3} \cdot 10^3) = 129.12 \cdot 10^3 \text{ J/}\theta\text{K}$$

Stabilitetsvillkor 2:

$$UA + q_{scp} > \left(\frac{dQ_c}{dT} \right)_s$$

$$UA + q_{scp} = 27.7 \cdot 10^3 \text{ J/}\theta\text{K}$$

Båda villkoren uppfylls, driftpunkten stabil

Test av tumregeln:

$$\Delta T_c > \Delta T_m$$

$$\Delta T_m = \frac{339 - 310}{T - T_K} = 29 \text{ K}$$

$$\Delta T_c = \frac{RT^2}{E} = \frac{339^2}{12000} = 9.6 \text{ K}$$

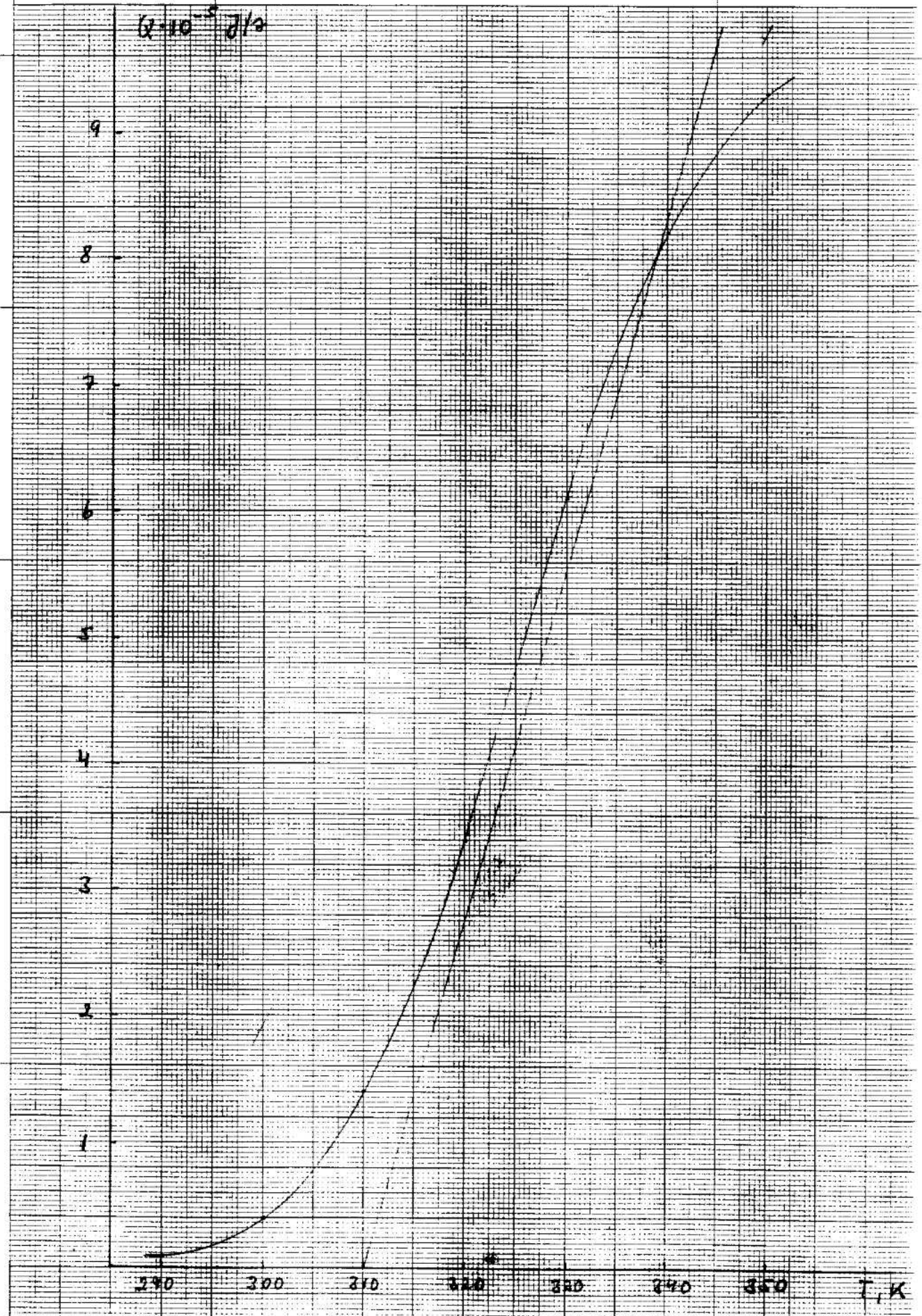
Villkoret ej uppfyllt. Beror på att tumregeln förutsätter

$$UA \gg q_{scp}$$

$$(UA = 9 \cdot 10^3 \text{ J/}\theta\text{K}, \quad q_{scp} = 18.7 \cdot 10^3 \text{ J/}\theta\text{K})$$

$$\alpha = f(T)$$

Wp. 4



Uppg. 5 1998-01-16

Eftersom $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \dots = \Delta t_n = \Delta t$
och $c_1 = c_n = 0$ gäller

$$\langle t \rangle = \frac{\sum t c}{\sum c}$$

$$\sigma_t^2 = \left(\frac{\sum t^2 c}{\sum c} \right) - \langle t \rangle^2$$

t	t^2	c	$t c$	$t^2 c$
0	0	0	0	0
10	100	1,63	16,3	163
20	400	3,96	79,2	1584
30	900	3,00	90,0	2700
40	1600	1,39	55,6	2224
50	2500	0,57	25,5	1275
60	3600	0,10	6,0	360
70	4900	0	0	0
Σ		10,59	272,6	8306

$$\langle t \rangle = \frac{272,6}{10,59} = 25,74 \text{ min}$$

$$\sigma_t^2 = \frac{8306}{10,59} - (25,74)^2 = 121,8$$

$$N = \frac{\langle t \rangle^2}{\sigma_t^2} = \frac{662,5}{121,8} = \underline{\underline{5,44 \text{ st}}}$$