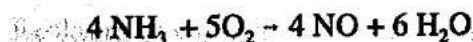


23/maj - 93

Uppgift 1 (materialbalans)

4 poäng

Kväveoxid (NO) framställs genom katalytisk oxidation av ammoniak (NH₃) med rent syre (O₂).
Reaktionen följer stökiometriskt sambandet



Det färska inflödet till en reaktor för framställning av kväveoxid innehåller endast torr ammoniak och syre med 20% överskott av syre. Omsättningsgraden med avseende på ammoniak uppgår till $x_{\text{NH}_3} = 0,70$ över själva reaktorn. Efter reaktorn finns en separeringsenhet (bl a destillationstorn) från vilken går tre strömmar. Dessa strömmar består av ren ammoniak som återförs till reaktorinflödet, vatten innehållande 5 mol % ammoniak samt en produktström som enbart innehåller kväveoxid och syre.

Beräkna mängden kväveoxid i produktflödet per 100 mol införd färsk ammoniak, dvs utbytet för anläggningen.

Uppgift 2 (ideala reaktorer)

6 poäng

Produkten R skall framställas ur råmaterialen A och B i en isoterm process genom följande homogena reaktion i vätskefas:



Vid processen nedbrytes samtidigt ~~den bildade produkten R~~ ^{reaktanten A} enligt reaktionen:



Beräkna reaktorvolym och tillhörande medeluppehållstid om processen utföres i en

- ideal satsreaktor
- ideal tubreaktor
- ideal kontinuerligt arbetande tankreaktor

Processen skall genomföras vid 60°C vid vilken temperatur hastighetskonstanterna har värdena $k_1 = 0,05 \text{ min}^{-1}$ och $k_2 = 0,025 \text{ min}^{-1}$. Ingående lösning innehåller 1,20 mol/liter av A och 15,00 mol/liter av B, men inget R eller S. Föreningen A har molvikten 80 g/mol och B molvikten 18 g/mol. Tid för växling av charge och uppkörning uppgår till 30 min vid satsreaktorn.

Produktionen av den önskade produkten R skall uppgå till 100 kg R/tim. Halten av R i produktflödet måste vara 0,60 mol/l.

Uppgift 3 (reaktorstabilitet)

OBS! Ej för Kb-studenter

4 poäng

I en tankreaktor med volymen 750 l sker en 1:a ordningens irreversibel reaktion



Reaktorn är kylmantlad med en kylvattentemperatur uppgående till 270 K.

Bestäm reaktorns stationära driftpunkter samt omsättningen vid den övre driftpunkten. Visa om den övre driftpunkten är stabil eller instabil.

Övriga data:

- $q = 50 \text{ l/min}$
- $c_{A0} = 2,2 \text{ mol/l}$
- $k = 6 \cdot 10^5 \exp(-5529/T) \text{ min}^{-1}$
- $U = 10,4 \text{ cal/(cm}^2 \text{ h } ^\circ\text{C)}$ (värmegenomgångskoefficienten)
- $A = 0,5 \text{ m}^2$ (värmeväxlararen)
- $\Delta H = -50\,000 \text{ cal/mol A}$
- $C_p = 0,3 \text{ cal/(g } ^\circ\text{C)}$ konstant inom aktuellt temperaturområde
- $\rho = 1,05 \text{ g/cm}^3$ konstant inom aktuellt temperaturområde
- $T_0 = 285 \text{ K}$

Uppgift 4 (beskrivande)

OBS! Ej för Kb-studenter

10 poäng

- a) Gasfasreaktionen $A \rightarrow R$ med hastighetsekvationen $r = k \cdot c_A$ skall genomföras i en ideal adiabatisk tubreaktor. För denna process önskas en 90%-ig omsättning av reaktanten A.

Ställ upp de nödvändiga ekvationerna och förklara hur man kan beräkna reaktorvolymen då följande indata är givna:

Indata: ΔH vid T_{ref} , $c_{pj}(T)$, $k(T)$, q_f , c_{Af} (enbart A i reaktorinflödet), totaltrycket P (isobar process).

- b) Förklara varför reaktionshastigheten för en exoterm jämviktsprocess går genom ett maximum med ökande omsättningsgrad.
- c) Varför används seriekopplade reaktorer vid exoterma jämviktsprocesser? Diskutera också varför dessa reaktorer industriellt oftast är adiabatiska.
- d) Vad menas med fasplansanalys i reaktorsammanhang? Diskutera för några olika reaktantinitialhalter och initialtemperaturer inne i en ideal tankreaktor, hur systemet svänger in mot olika stationära driftpunkter vid uppstart.

Uppgift 5 (reella reaktorer)

6 poäng

För genomförandet av homogenfasreaktionen



användes liggande cylindrisk reaktor försedd med bafflar. Halten A i ingående lösning = 8 mol/l. Vid temperaturen 40°C har hastighetskonstanten k värdet 0,125 l mol⁻¹ min⁻¹.

För framtagning av reaktorns uppehållstidsfördelning injicerades momentant ett radioaktivt spårämne på ingångssidan och radioaktiviteten som funktion av tiden uppmättes genom prover på utgångsflödet. Därvid erhållna resultat har omräknats till följande frekvensfunktion:

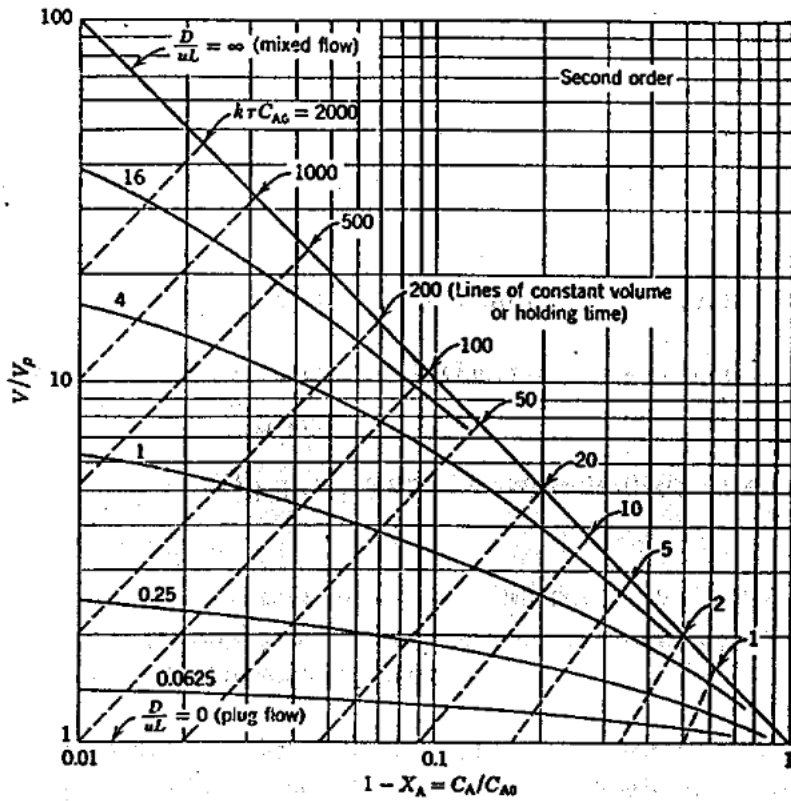
t/min	E(t) · 10 ⁴	t/min	E(t) · 10 ⁴
0	0	26	314,5
2	6,6	28	264,8
4	16,5	30	215,2
6	33,1	32	182,1
8	82,8	34	145,7
10	165,5	36	105,9
12	364,1	38	76,13
14	480,0	40	46,34
16	529,6	42	23,17
18	546,2	44	9,39
20	529,6	46	4,97
22	463,4	48	2,32
24	390,6	50	0,99

Vidare har ur samma frekvensfunktion medeluppehållstiden bestämts till 21,06 min samt variansen i uppehållstiden till 58,43 min². Reaktorn antas ur dispersionssynpunkt vara sluten.

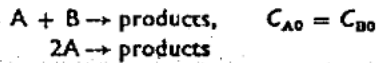
Beräkna omsättningen av komponent A för följande blandningsmodeller:

- Segregationsmodellen
- Dispersionsmodellen
- Tankseriemodellen

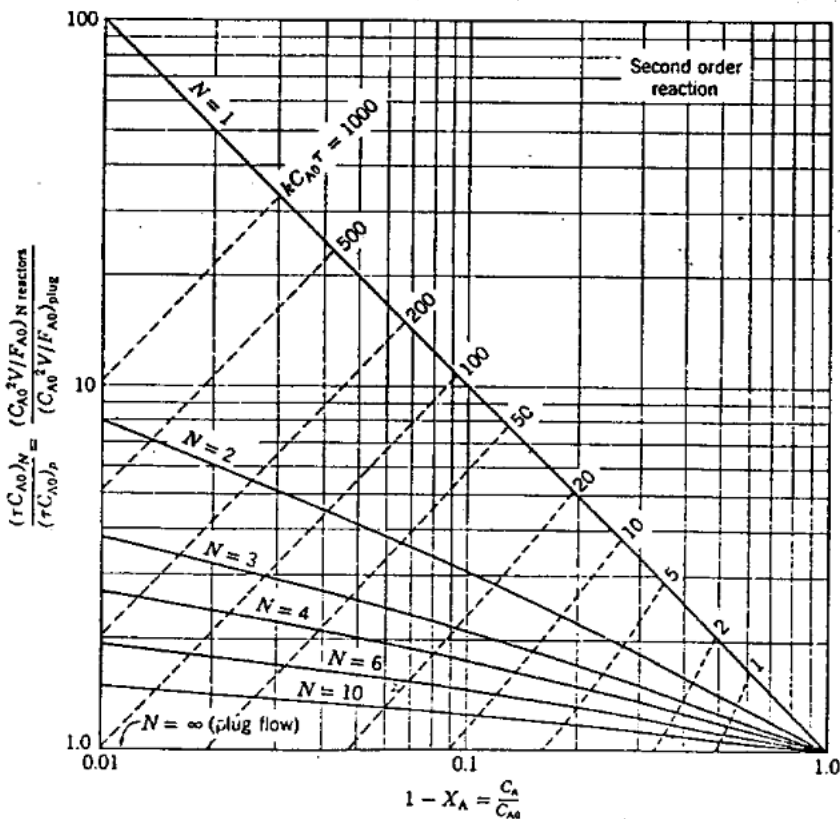
Obs! Bifogade diagram (se nästa sida) får användas för lösning av uppgiften.



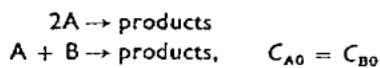
Comparison of real and plug flow reactors for the second-order reactions



assuming negligible expansion; from Levenspiel and Bischoff (1959, 1961).



Comparison of performance of a series of N equal-size mixed reactors with a plug flow reactor for elementary second-order reactions



with negligible expansion. For the same processing rate of identical feed the

Uppgift 6 (beskrivande)

OBS! Enbart för Kb-studenter

10 poäng

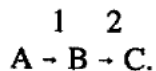
- a) Gasfasreaktionen $A \rightarrow R$ med hastighetsekvationen $r = k \cdot c_A$ skall genomföras i en ideal adiabatisk tubreaktor. För denna process önskas en 90%-ig omsättning av reaktanten A.

Ställ upp de nödvändiga ekvationerna och förklara hur man kan beräkna reaktorvolymen då följande indata är givna:

Indata: ΔH vid T_{ref} , $c_{pj}(T)$, $k(T)$, q_p , c_{Af} (enbart A i reaktorinflödet), totaltrycket P (isobar process).

- b) Diskuter, vilka reaktorer, ideal tank- eller ideal tubreaktor, är att föredraga ur kapacitetssynvinkel vid en kontinuerlig enzymatisk process. Processen är autokatalytisk, vilket innebär att hastigheten har ett maximum då omsättningsgraden ändras.

- c) Diskutera hur man kan, med hjälp av ett lämpligt val av temperaturnivå, maximera selektiviteten med avseende på den önskade produkten B i de konsekutiva reaktionerna



E_1 (aktiveringsenergin för bildandet av B) > E_2 (aktiveringsenergin för bildandet av C)

- d) Diskutera integralreaktors nackdelar vid kinetiska mätningar.

Uppgift 7 (ideal tankreaktor, material- och värmebalans) **OBS! Enbart för Kb-studenter** 4 poäng

En gasfasreaktion $2A + 3B \rightarrow C + 2D$ sker i en ideal tankreaktor. Reaktionshastigheten skrivs: $r = k c_A c_B$. Inflödet består av enbart A och B.

Använd följande storheter

$$F_A^0, F_B^0 \text{ mol/s}; x_A$$

$$\langle c_{pA} \rangle^T, \langle c_{pB} \rangle^T, \langle c_{pC} \rangle^T, \langle c_{pD} \rangle^T, \langle c_{pA} \rangle^{Tf}, \langle c_{pB} \rangle^{Tf} \{J/(mol K)\}$$

$$T \{K\}, T_f \{K\}; T_{ref}; \Delta H \{J/mol\} \text{ given vid } T_{ref}$$

$$P \{Pa\}; R \{Pa m^3/(mol K)\}; V \{m^3\}; k \{m^3/(mol s)\}$$

och ställ upp:

- Materialbalans för A
- Materialbalans för B
- Materialbalans för C
- Materialbalans för D
- Värmebalans för reaktorn

Svar till tentamensuppgifter: KRT-GK 1998-05-23

1) Utbytet $\eta = 0,927$

2) a) $V_r = 1,37 \text{ m}^3$ $\tau = 48,5 \text{ min}$
b) $V_r = 0,52 \text{ m}^3$ $\tau = 18,5 \text{ min}$
c) $V_r = 1,13 \text{ m}^3$ $\tau = 40 \text{ min}$

3) En driftpunkt vid $T = 615 \text{ K}$ där $x = 0,999$. Denna driftpunkt är stabil!

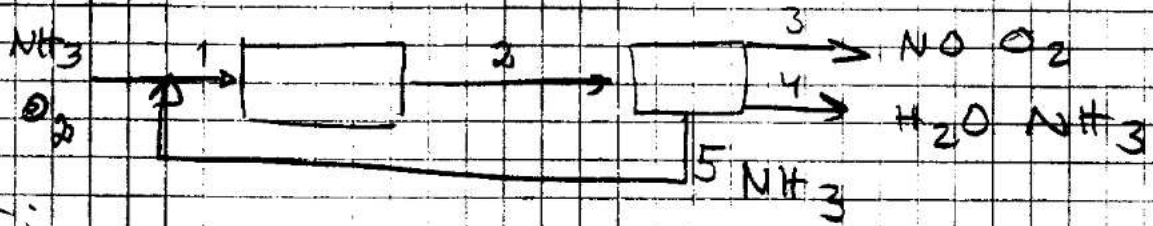
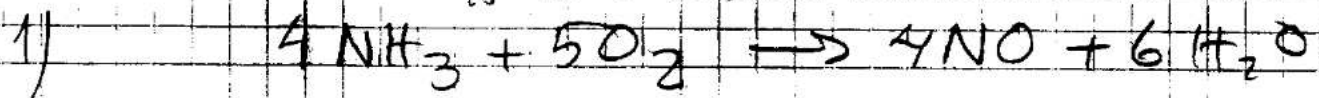
4) beskrivande!

5) a) $x = 0,973$ b) $x = 0,977$ c) $x = 0,966$ (för 8 ideala tankar)

6) beskrivande!

7) beskrivande!

48-05-23



Given:

in 20% overshoot $\text{O}_2 \Rightarrow \frac{5}{4} \cdot 1,2 \cdot n_{\text{NH}_3^f}$

i 4 5 mol% NH_3

$x_{\text{reak}} = 0,7$

Result: $\frac{n_{\text{NO}}^3}{n_{\text{NH}_3^f}}$

to MB over systemet map

N: $n_{\text{NO}}^3 + n_{\text{NH}_3}^4 = n_{\text{NH}_3}^f$

H: $n_{\text{H}_2\text{O}}^4 \cdot 2 + n_{\text{NH}_3}^4 \cdot 3 = n_{\text{NH}_3}^f \cdot 3$

$n_{\text{H}_2\text{O}}^4 = 0,95 \cdot n_{\text{tot}}^4$

$n_{\text{NH}_3}^4 = 0,05 \cdot n_{\text{tot}}^4$

i H-balk: $2 \cdot 0,95 \cdot n_{\text{tot}}^4 + 3 \cdot 0,05 \cdot n_{\text{tot}}^4 = 3 \cdot n_{\text{NH}_3}^f$

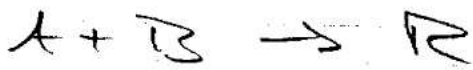
$\Rightarrow n_{\text{tot}}^4 = \frac{3 n_{\text{NH}_3^f}}{2 \cdot 0,95 + 3 \cdot 0,05} = \frac{3 \cdot n_{\text{NH}_3^f}}{2,05}$

N: $\Rightarrow n_{\text{NO}}^3 = n_{\text{NH}_3}^f - n_{\text{NH}_3}^4 = n_{\text{NH}_3}^f \left(1 - \frac{3 \cdot 0,05}{2,05}\right)$

$= \frac{38}{41} \cdot n_{\text{NH}_3}^f$

per 100 mol $n_{\text{NH}_3}^f \Rightarrow n_{\text{NO}}^3 = 92,68 \text{ mol}$

$\Rightarrow \text{utbytte } \eta = 0,927$



$$r_1 = k_1 C_A$$

$$k_1 = 0,05 \text{ min}^{-1}$$

$$r_2 = k_2 C_A$$

$$k_2 = 0,025 \text{ min}^{-1}$$

Sols

MB A

$$\frac{dC_A}{dt} = -(k_1 + k_2) C_A$$

$$C_A = C_{Af} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

R:

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A = k_1 C_{Af} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

$$C_R = k_1 C_{Af} \int_0^t e^{-(k_1 + k_2)t} dt =$$

$$= k_1 C_{Af} \left[\frac{1}{-(k_1 + k_2)} e^{-(k_1 + k_2)t} \right]_0^t$$

$$= \frac{k_1 C_{Af}}{k_1 + k_2} (1 - e^{-(k_1 + k_2)t})$$

$$\equiv \frac{1}{2} C_{Af}$$

$$e^{-(k_1 + k_2)t} = 1 - \frac{k_1 + k_2}{2k_1} = 1 - \frac{0,05 + 0,025}{2 \cdot 0,05}$$

$$= 0,25$$

$$t = \underline{18,48 \text{ min}}$$

$$t_{\text{batch}} = 18,48 + 30 = 48,48 \text{ min}$$

$$\dot{m}_R = \frac{V_r}{t_{\text{batch}}} \cdot C_R \cdot M_R$$

$$V_r = \frac{\dot{m}_R t_{\text{batch}}}{C_R M_R} = \frac{100 \cdot 10^3 \text{ g/h} \cdot \frac{48,48}{60} \text{ h}}{0,6 \text{ mol/l} \cdot 98 \text{ g/mol}}$$
$$= 1374 \text{ l} = \underline{\underline{1,37 \text{ m}^3}}$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-(k_1 + k_2)t} = e^{-(0,05 + 0,025) \cdot 18,48}$$
$$= 0,25$$

$$x_A = 1 - 0,25 = \underline{\underline{0,75}}$$

$$S = \frac{r_1}{r_2} = \frac{k_1 C_A}{k_2 C_A} = \frac{0,05}{0,025} = 2$$

Tubs

$$A: -q dc_A = (k_1 + k_2) C_A dV_r$$

$$\tau = \frac{V_r}{q} \quad d\tau = \frac{dV_r}{q}$$

$$-dc_A = (k_1 + k_2) C_A d\tau$$

$$\frac{dc_A}{d\tau} = -(k_1 + k_2) C_A$$

$$R: -q dc_R + k_1 C_A dV_r = 0$$

$$-dc_R + k_1 C_A d\tau = 0$$

$$\frac{dc_R}{d\tau} = k_1 C_A$$

Samma som för subreaktor

$$\Rightarrow \tau = 18,48 \text{ min}$$

$$x_A = 0,75$$

$$S = 2$$

Reaktorvolym från prod. krav

$$\dot{m}_R = \frac{V_r \cdot q}{\tau} C_R M_R$$

$$V_r = \frac{\dot{m}_R \tau}{C_R M_R} = \frac{100 \cdot 10^3 \text{ g/h} \cdot \frac{18,48}{60} \text{ h}}{0,6 \text{ g/l} \cdot 98 \text{ g/mol}} = 524 \text{ l}$$
$$= \underline{\underline{0,52 \text{ m}^3}}$$

1 tank

$$A: q C_{Af} - q C_A - (k_1 + k_2) C_A V_r = 0$$

$$C_{Af} - C_A = (k_1 + k_2) C_A \tau$$

$$C_A = \frac{C_{Af}}{1 + (k_1 + k_2) \tau}$$

$$R: -q C_R + k_1 C_A V_r = 0$$

$$C_R = k_1 C_A \tau = \frac{k_1 C_{Af} \tau}{1 + (k_1 + k_2) \tau} = \frac{k_1 C_{Af}}{\frac{1}{\tau} + k_1 + k_2}$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{k_1 C_{Af}}{C_R} - k_1 - k_2 =$$

$$= \frac{0,05 \cdot 1,2}{0,6} - 0,05 - 0,025 = 0,025$$

$$\tau = \underline{\underline{40 \text{ min}}}$$

FSS from front

$$V_r = \frac{\dot{m}_R \tau}{C_R M_R} = \frac{100 \cdot 10^3 \text{ g/h} \cdot \frac{40}{60} \text{ h}}{0,6 \text{ mol/l} \cdot 98 \text{ g/mol}} = 1134 \text{ l}$$
$$= \underline{\underline{1,13 \text{ m}^3}}$$

$$\frac{C_A}{C_{Af}} = \frac{1}{1 + (k_1 + k_2)\tau} = \frac{1}{1 + (0,05 + 0,025) \cdot 40} = 0,25$$

$$x_A = 1 - 0,25 = \underline{\underline{0,75}}$$

$$S = \frac{k_1 C_A}{k_2 C_A} = \frac{0,05}{0,025} = \underline{\underline{2}}$$

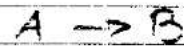
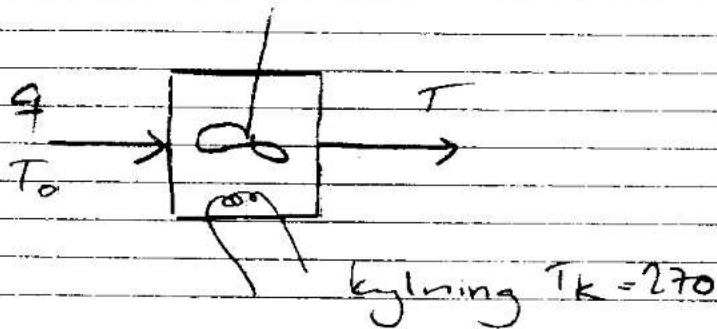
	<u>Sals</u>	<u>Two</u>	<u>Tandis</u>
$V_r (m^3)$	1,37	0,52	1,13
τ (min)	48,48	18,48	40
x_A	0,75	0,75	0,75
S_{21}	2	2	2

Reaktor stabilitet

(3)

tid.

uppgift 3 tenta 980523



$$r = k C_A$$

VB över reaktorn

$$in - ut + reagerat - kylning = 0$$

$$F C_p (T_0 - T_{ref}) - F C_p (T - T_{ref}) + r V_r (-\Delta H) - U A (T - T_k) = 0$$

$$VB ger \quad Q_b = Q_r$$

$$Q_r = r V_r \cdot (-\Delta H) = 6 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[-\frac{5529}{T}\right] C_A V_r (-\Delta H)$$

$$Q_b = F C_p (T - T_0) + U A (T - T_k) \quad \left[\frac{\text{cal}}{\text{min}}\right]$$

MB över reaktorn

$$Q_r = F C_A^0 x \cdot (-\Delta H)$$

$$F C_{A0} - F C_A - r V_r = 0 \quad \left[\frac{\text{mol}}{\text{min}}\right]$$

$$F C_{A0} - F C_A - k C_A V_r = 0$$

$$C_A = \frac{F C_{A0}}{F + k V_r} = \frac{C_{A0}}{1 + k \tau}$$

Alternativt

$$F C_{A0} - F C_{A0}(1-x) - k C_{A0}(1-x) V_r = 0$$

$$F - F + Fx - k V_r + k x V_r = 0$$

$$x = \frac{k V_r}{F + k V_r} = \frac{k \tau}{1 + k \tau}$$

2(3)

$$\Rightarrow Q_r = k C_A V_r (-\Delta H) = 6 \cdot 10^5 \exp\left(-\frac{5529}{T}\right) \frac{7 \cdot 4^0}{7+kV_r} V_r (-\Delta H)$$

Plotta Q_r och Q_b

Stärningspkt ger en driftpunkt för

$$\left\{ \begin{array}{l} T = 615 \text{ K} = 342^\circ \text{C} \\ C_A = 0.0018 \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow x = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} = 0.9992$$

Stabilitet

icke-adiabatisk \Rightarrow kolla båda villkor.

Villkor 2

$$V_A + 7 \gamma C_p > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T}\right)_x (1-x) = \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T}\right)_{T_s}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{dQ_b}{dT}\right)_s > \left(\frac{dQ_r}{dT}\right)_s \quad \frac{C_r}{dT} = 72$$

kolla i figur \Rightarrow uppfyllt

Villkor 1

$$V_A + 7 \gamma C_p (2 + k\tau) > \left(\frac{dQ_r}{dT}\right)_x$$

$$\tau_h = 1.9026 \cdot 10^7 \quad \frac{\text{cal}}{\text{min} \cdot ^\circ \text{C}}$$

$$Q_r = k C_{A0} (1-x) V_r (-\Delta H) = 6 \cdot 10^5 \exp\left[-\frac{5529}{T}\right] 4^0 (1-x) V_r (-\Delta H)$$

$$\Rightarrow \tau_h = \left(\frac{dQ_r}{dT}\right)_x = \frac{5529}{T^2} \cdot 6 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[-\frac{5529}{T}\right] C_{A0} (1-x) V_r (-\Delta H)$$

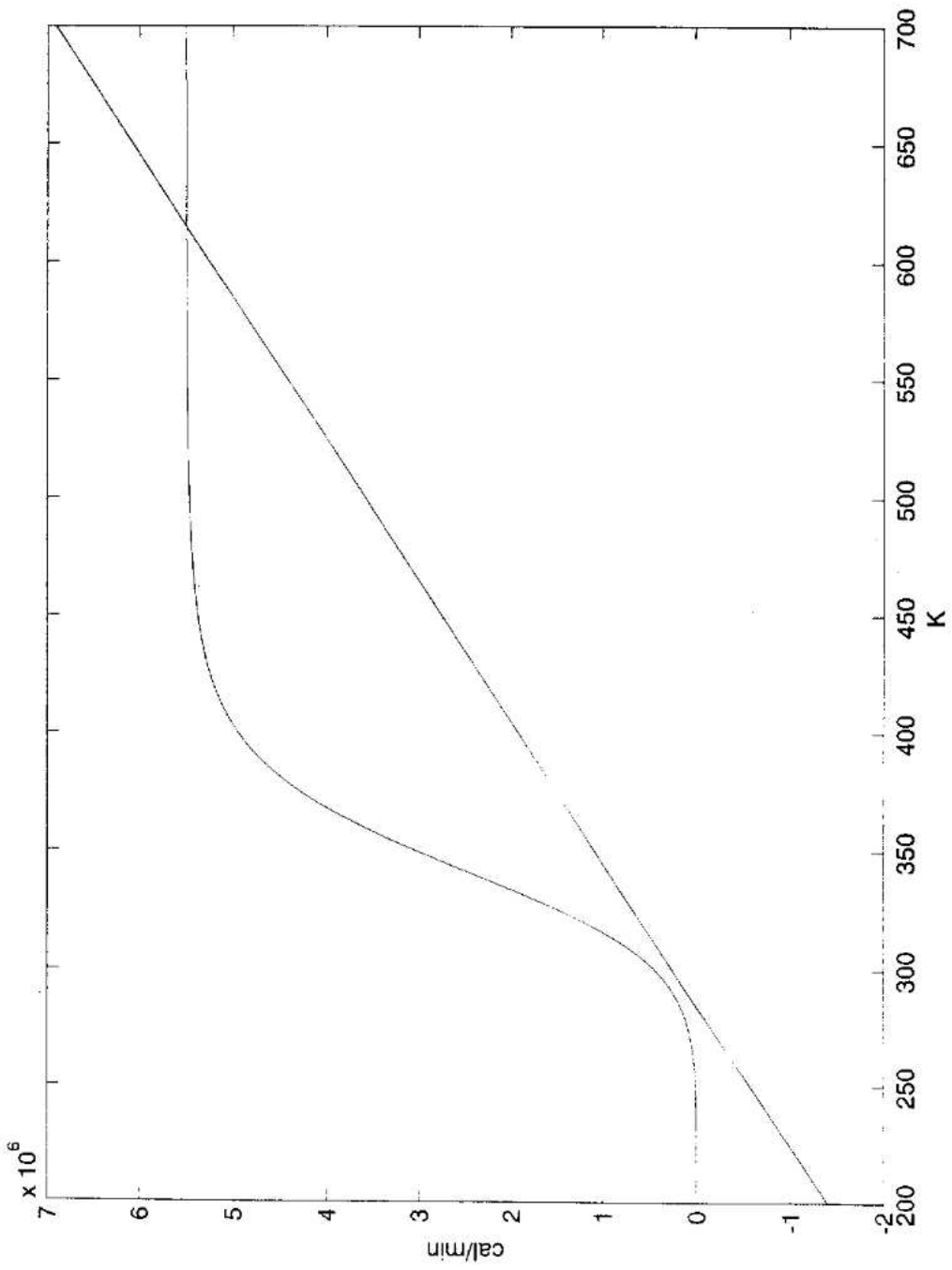
3(3)

$$HL = 7,9043 \cdot 10^4$$

$$V_h = 1,9026 \cdot 10^7$$

⇒ Stabil punkt.

UPPG 3 980523



Tenta 980523
Uppg 3 Stabilitet

T (K)	Qb 1.0e+006 *	<i>1/2</i>	Qr 1.0e+006 *
200	-1.3994		0.0000
250	-0.5686		0.0123
300	0.2622		0.4503
350	1.0931		3.0453
400	1.9239		4.9465
450	2.7548		5.3706
500	3.5856		5.4615
550	4.4164		5.4858
600	5.2472		5.4939
650	6.0781		5.4970
700	6.9089		5.4984

% KRTgk Tentamen 98-05-23 Uppgift 5

% Reella reaktorer

% Reaktionen 2A --> R $r = k * c_A$

% DATA

```

cAf = 8.0 ; % mol/l
k = 0.125; % l/(mol*min)
tm = 21.06; % min
s = 7.66; % min
ts = [0:2:48 50]'; % observerad spårämnestid, min
E = [0 6.6 16.5 33.1 82.8 165.5 364.1 480.0 529.6 546.2 529.6 463.4
390.6...
314.5 264.8 215.2 182.1 145.7 105.9 76.13 46.34 23.17 9.39 4.97 2.32 0.99]'*1.0e-4
; % Uppehållstidsfördelning
plot(ts,E),xlabel('ts,min'),ylabel('E.min-1'),title('Frekvensfunktion')

```

% Beräkningar

```

tmedel=trapz(ts,ts.*E); % = tm
var=trapz(ts,(ts-tmedel).^2.*E); % = s^2

```

% Tankseriemodellen

```

N=tmedel^2/var; % antalet tankar
Ntot=ceil(N); % antalet hela tankar
cA(1)=cAf;
for i=1:Ntot
    cA(i+1)=(sqrt(8*k*tmedel/Ntot*cA(i)+1)-1)/4/k/tmedel*Ntot;
end
omstank=1-cA(Ntot+1)/cAf;
disp(' '),disp(' ')
disp(['Exakt beräknad omsättningsgrad för ',num2str(Ntot),' st ideala tankar: ',num2str(
omstank)])

```

for N=8 0.9662 = X_A

% Parametrar för lösning med diagram

```

disp(' ')
disp('Tankseriemodell: Parametrar för lösning med diagram. ')
disp(['antal tankkar N = ',num2str(N),' k*tmedel*cAf = ', num2str(k*tmedel*cAf)])
disp(['eller 2*k*tmedel*cAf = ',num2str(2*k*tmedel*cAf)])
disp('Diagram ger omstank = 0.935 eller 0.960')

```

% Dispersionsmodellen

```

% Beräkning av dispersionsparametern p=Dea/vl
p = fsolve('uppg5disp',0.1,[],[],tmedel,var);
disp(' ')
disp('Dispersionsmodell: Parametrar för lösning med diagram. ')
disp(['Dea/vL = ', num2str(p),' k*tmedel*cAf = ', num2str(k*tmedel*cAf)])
disp(['eller 2*k*tmedel*cAf = ',num2str(2*k*tmedel*cAf)])
disp('Diagram ger omsdisp = 0.940 eller 0.965')

```

% Segregationsmodellen

```

omsseg = 1-trapz(ts,1./(2*k*ts*cAf+1).*E);
disp(' ')
disp(['Segregationsmodell: omsseg = ',num2str(omsseg)])

```

$X_A = 0.9732$

% Idel tubreaktor

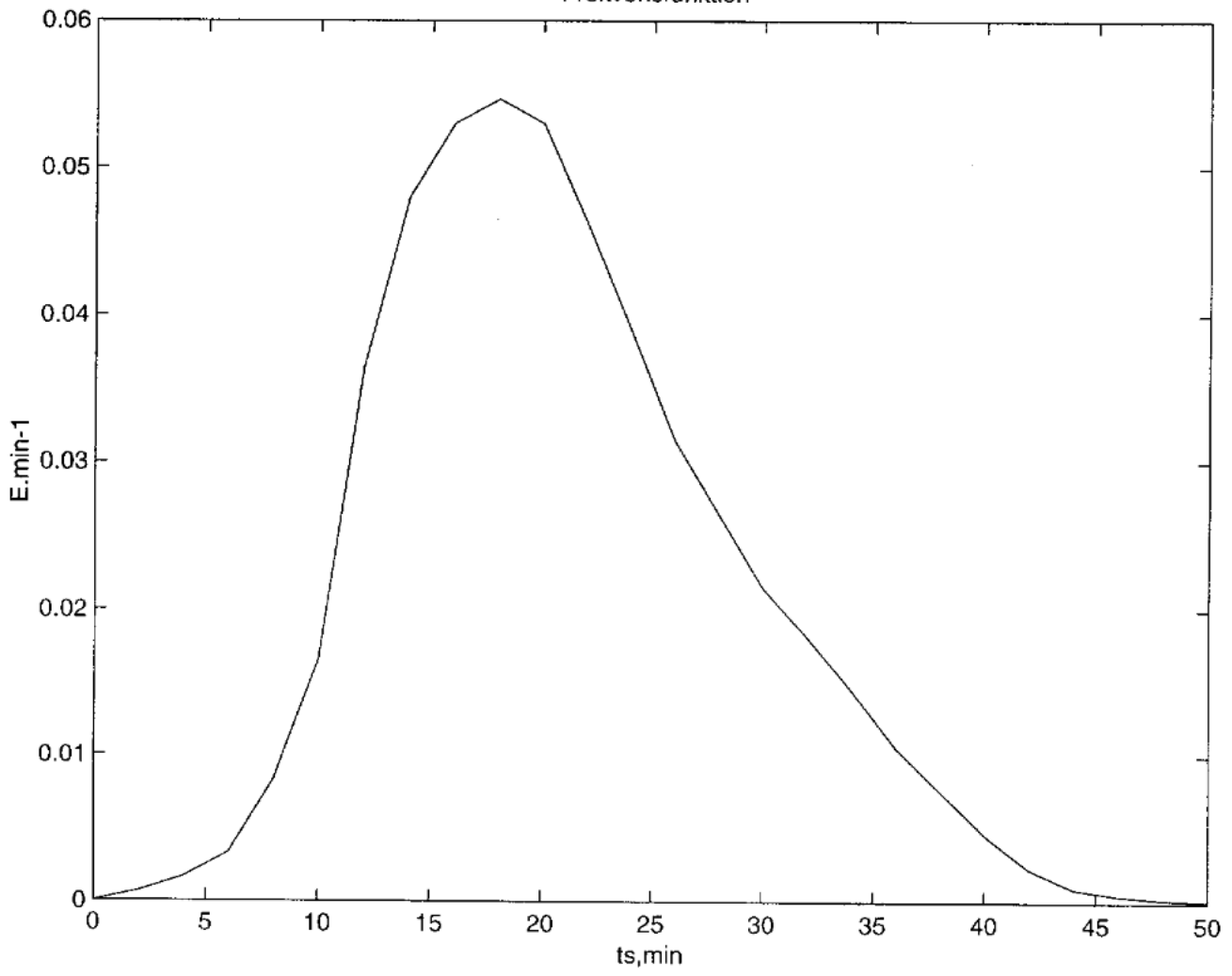
```

omstube=1-1/(2*k*cAf*tmedel+1);
disp(' ')
disp(['Ideal tubreaktor: omstube = ',num2str(omstube)])

```

$X_A = 0.9768$

Frekvensfunktion



% Funktionsfil för beräkning av dispersionskoefficient

```
function f = uppg5disp(p,tmedel,var)
f = 2*p -2*p^2*(1-exp(-1/p))-var/tmedel^2;
```