

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3 (KKR 100)**Fredagen den 22 december 2006 kl 8:30-12:30 i V****Examinator:** Derek Creaser

Derek Creaser (0702-283943) kommer att besöka tentamenslokalen ca. 9:30 och 11:00.
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 8 januari 2007.

Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare
Formelsamlingar utgiven av institutionen
TEFYMA
Standard Mathematics Handbook
beta Mathematics Handbook
Physics Handbook
Handbook of Chemistry and Physics

Ej tillåtna hjälpmedel

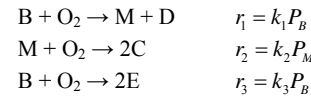
Kursbok, "Elements of Chemical Reaction Engineering"
Kompedium I KRT
KRT övningsbok
Lösta exempel

Man får svara på svenska eller engelska!**Betygskala:**

Poäng	Betyg
15-19	3
19.5-24	4
24.5-30	5

**Uppgift 1** (5 poäng)

En katalytisk partiell oxidationsreaktion utföres i en fluidiserad bäddreaktor som kan anses fungera som en ideal tankreaktor. Reaktionsschemat är som följer:



Reaktorn körs isotermt vid 350°C och isobart vid 2 bar. Molförhållandet i inflödet mellan luft (79 mol% N₂, 21 mol% O₂) och B är 100:1 och totala inflödes hastigheten är 500 mol h⁻¹. Vilken mängd katalysator maximerar bildningshastigheten av produkten M?

DATA:

	Hastighetskonstant vid 350°C (mol h ⁻¹ (g cat.) ⁻¹ bar ⁻¹)
k_1	1.141×10^{-3}
k_2	2.468×10^{-3}
k_3	0.396×10^{-3}

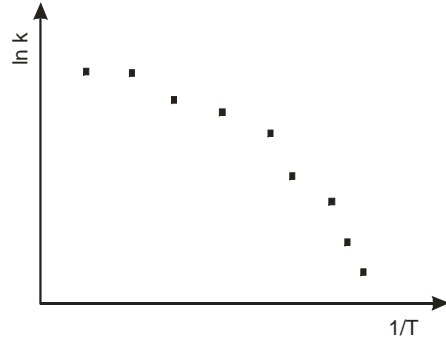
Uppgift 2 (6 poäng)

En tubulär reaktor med en diameter på 0.1 m och längd på 6.36 m används till att genomföra en första ordningens irreversibel reaktion (A → B) med hastighetskonstanten $k = 0.25 \text{ min}^{-1}$. Inflödes hastigheten till reaktorn är $9.7 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$. Spårämnesundersökningar utfördes på reaktorn som visade att uppehållstidsfördelningens varians (σ^2) var 6.10 min^2 . En konsult har föreslagit att genom att göra justeringar av reaktorns design kunde flödesbilden optimeras så att signifikant förbättring av omsättningsgraden uppnås.

- För att testa konsultens åsikt, beräkna maximalt möjlig förbättring av omsättningsgraden. Förklara antaganden och slutsatser.
- Kan du förslå vilka modifieringar av reaktorns design som kan göras för att förbättra omsättningsgraden? Förklara varför och kvantifiera möjliga ändringar.

Uppgift 3 (7 poäng)

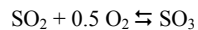
- (a) En kemist hade utfört nio experiment där hon hade skattat hastighetskonstanten (k) för en gasfas-reaktion inom ett brett temperaturområde. Reaktionen var katalyserad av en porös katalysator (fast fas). För att bestämma aktiveringsenergin för reaktionen gjordes en plot av de experimentella resultaten enligt nedan. Kemisten blev förbryllad av att plotten inte blev linjär och hon misstänkte att detta var orsakat av förändringar i reaktionsmekanismen eller rent av experimentella felkällor. Föreslå en alternativ förklaring till de icke-linjära resultaten. Föreslå även hur hon bäst skall gå tillväga för att skatta reaktionens aktiveringenergi.



- (b) Beskriv hur "cold-shot cooling" kan användas för att genomföra (ev. bättre: för att öka utbytet vid...) exoterma, jämviktsbegränsade reaktioner. Vilka är fördelarna med detta förfarande och vid vilka betingelser är detta förfarande fördelaktigt och under vilka betingelser kan det vara olämpligt eller opraktiskt?

Uppgift 4 (6 poäng)

Den katalytiska och jämviktsbegränsade oxidationen av svaveldioxid:



skall utföras i en fluidiserad bäddreaktor. Den fluidiserade bädden kan antas fungera som en ideal tankreaktor. Inflödet till reaktorn består av 7.8 mol% SO_2 , 10.8 mol% O_2 och 81.4 mol% N_2 vid 825 K och 1 atm. Molflödet av SO_2 i inloppet är totalt 10 mol/s. Den så kallade "locus of maximum rates", Γ , har beräknats och plottats i figuren nedan.

- (a) Vilken kyleffekt (i kW) skulle behövas för att uppnå 50% omsättningsgrad med minimal reaktorstorlek?
 (b) Vilken är den maximala omsättningsgrad som skulle kunna erhållas om reaktorn kördes adiabatiskt?

DATA:

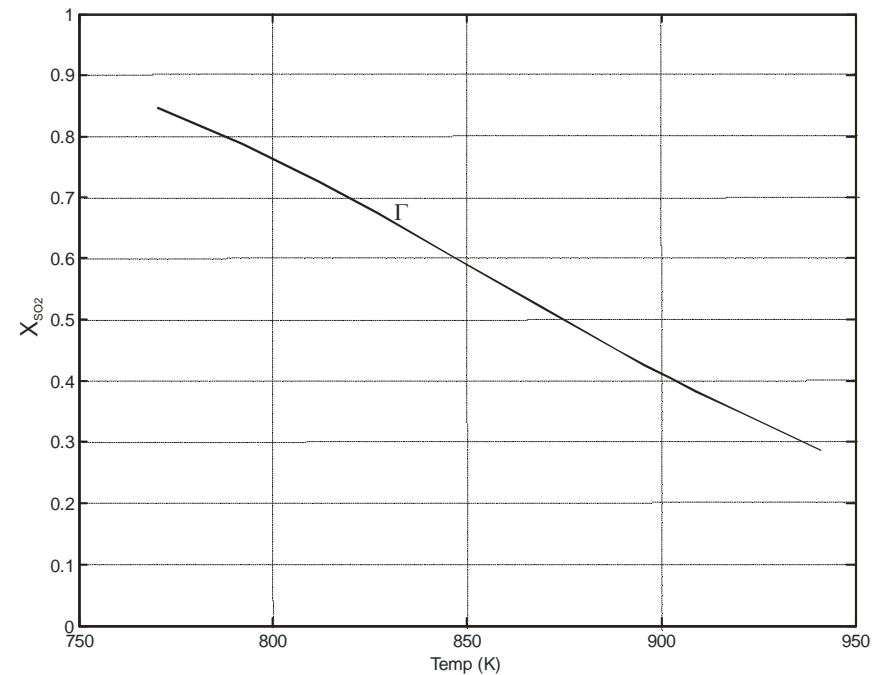
$$\Delta H_R = -98.9 \text{ kJ mol}^{-1} \quad (\text{kan antas konstant över det aktuella temperaturintervallet})$$

Molvärmen (oberoende av temperaturen):

Component	C_p ($\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$)
SO_2	51
O_2	33
SO_3	71
N_2	31

$$\text{Jämviktskonstant: } K_p = \exp\left(\frac{11300}{T} - 10.68\right) \text{ bar}^{0.5} \quad (\text{T i Kelvin})$$

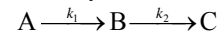
$$\text{vid } \Gamma, \left(\frac{\partial X}{\partial T}\right)_r = \left(\frac{\partial r}{\partial T}\right)_X = 0$$



Obs: Om du använder grafen ovan för din lösning, skriv ditt namn på denna sida och bifoga den till de andra sidorna med din lösning på denna uppgift.

Uppgift 5 (6 Points)

En katalytisk konsekutiv vätskefas-reaktion



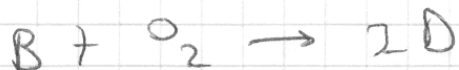
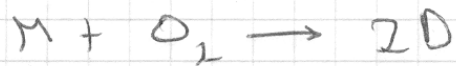
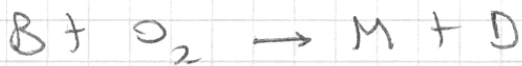
genomförs in en väl omrörd isotherm slurry-reaktor. Båda reaktionerna är av första ordningen med avseende på dess reaktanter. Endast reaktant A matas till reaktorn med ett flöde av 0.2 kmol s^{-1} med ett volymetriskt inflöde av $2 \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$. Reaktorn innehåller 50 kg sfäriska katalysatorpartiklar med en diameter på 1 mm. Man kan anta att katalysatorpartiklarna är tillräckligt små så att internt (por-) transportmotstånd är försumbart och att partiklarna rör sig med samma hastighet som fluiden i tanken (dvs $Sh=2$).

- Beräkna utbytet av B från reaktorn uttryckt som produktion av B per konsumtion av A.
- Vad blir utbytet av B om externt (film-) transportmotstånd försummas? Beskriv i detalj hur och varför det externa transportmotståndet påverkar utbytet av B. Vilka förändringar i reaktordesignen och/eller förändringar i driftsbetingelser skulle du föreslå för att öka utbytet av B?

DATA:

$k_1 = 1 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$	hastighetskonstant
$k_2 = 6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$	hastighetskonstant
$a = 4 \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$	yt-area per katalysatorvikt
$D_A = 5.0 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	diffusivitet av A i vätskan
$D_B = 2.0 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	diffusivitet av B i vätskan
$D_C = 8.3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	diffusivitet av C i vätskan

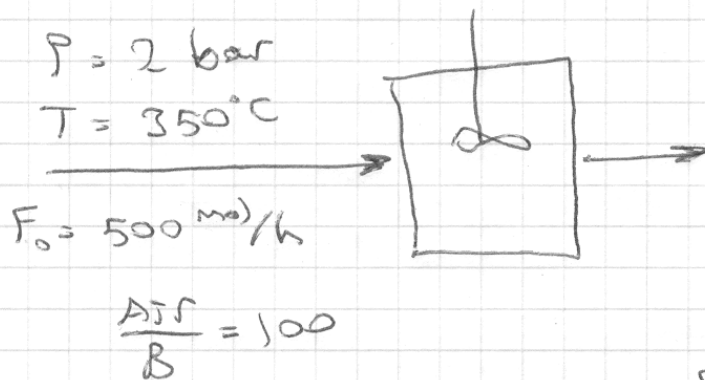
Uppgift 1



$$r_1 = k_1 P_B$$

$$r_2 = k_2 P_M$$

$$r_3 = k_3 P_B$$



$$\left. \begin{aligned} k_1 &= 1.141 \cdot 10^{-3} \\ k_2 &= 2.468 \cdot 10^{-3} \\ k_3 &= 0.396 \cdot 10^{-3} \end{aligned} \right\} \frac{\text{mol}}{\text{h} \cdot \text{g}}$$

F_0 is constant thru reactor!

Mole balance for B:

$$F_{B_0} - F_B = (r_1 + r_3) V$$

$$F_B = F_{B_0} - k_1 \frac{F_B}{F_0} P_{\text{tot}} W - k_3 \frac{F_B}{F_0} P_{\text{tot}} W$$

$$F_B = \frac{F_{B_0}}{\left(1 + k_1 \frac{P_{\text{tot}}}{F_0} W + k_3 \frac{P_{\text{tot}}}{F_0} W\right)}$$

Mole balance for M:

$$F_M = (r_1 - r_2) V$$

$$F_M = \left(k_1 \frac{F_B}{F_0} P_{\text{tot}} - k_2 \frac{F_M}{F_0} P_{\text{tot}}\right) W$$

$$F_M = \frac{k_1 \frac{F_B}{F_0} P_{\text{tot}} W}{1 + k_2 \frac{P_{\text{tot}}}{F_0} W}$$

$$500 \text{ mol/h} \cdot \frac{1 \text{ mol B}}{101 \text{ mol total}} = 4.95 \text{ mol/h} = F_B$$

then:

$$F_B = \frac{4.95}{1 + 4.56 \cdot 10^{-6} W + 1.58 \cdot 10^{-6} W} \quad (1)$$

and

$$F_B = \frac{4.56 \cdot 10^{-6} F_B W}{1 + 9.87 \cdot 10^{-6} W} \quad (2)$$

combine (1) and (2)

$$F_M = \frac{2.26 \cdot 10^{-5} W}{(1 + 4.56 \cdot 10^{-6} W + 1.58 \cdot 10^{-6} W) (1 + 9.87 \cdot 10^{-6} W)}$$

to find W that gives max. F_M one can.

- plot F_M against W

or

- set $\frac{dF_M}{dW} = 0$ solve for W

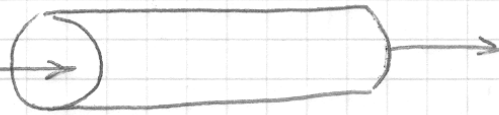
either way $F_M(\text{max}) = 0.72 \text{ mol/h}$

$$\left. \begin{aligned} \text{at } W &= 1.28 \cdot 10^5 \text{ g} \\ &= 128 \text{ kg} \end{aligned} \right\} \leftarrow$$

Upgrift 2

1/2

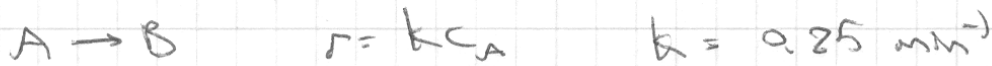
$$q = 9.7 \text{ dm}^3/\text{min}$$



$$\sigma^2 = 6.1 \text{ min}^2$$

$$d = 9.1 \text{ m} \quad L = 6.36 \text{ m}$$

$$U = \frac{\pi}{4} d^2 L = 49.95 \text{ dm}^3$$



First check conversion of A if reactor were ideal;

$$\frac{dF_A}{dV} = -k C_A$$

$$q C_{A_0} \frac{dX}{dV} = k C_{A_0} (1-X)$$

$$X = 1 - e^{-k \tau}$$

$$= 1 - \exp\left(-\frac{U}{q} k\right)$$

$$= 0.724 \text{ (highest possible)}$$

Conversion for reactor with axial dispersion

would be lower. Will find X for reactor

with dispersion (using closed-closed B.C.):

$$\tau = \frac{U}{q} = 5.15 \text{ min}$$

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} = \frac{2}{Pe^2} (Pe - 1 + \exp(-Pe)) = 0.23$$

solving $Pe = 7.5$

$$q = \sqrt{1 + \frac{4k\tau}{Pe}} = 1.30$$

$$x = 1 - \frac{4q \exp(-Pe/2)}{(1+q)^2 \exp(\frac{Peq}{2}) - (1-q)^2 \exp(-\frac{Peq}{2})}$$

$$\frac{Peq}{2} = 4.87$$

$$Y = 0.679$$

$$\frac{Y_{ideal}}{Y_{diff}} = 1.07$$

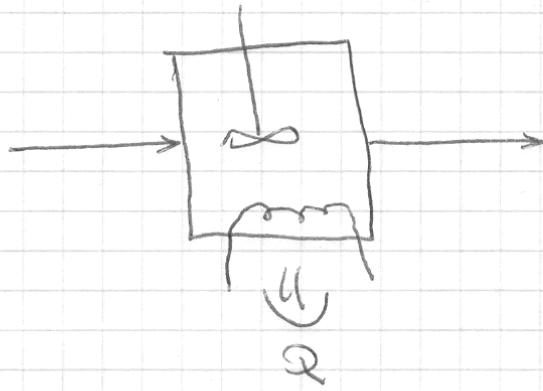
(a) This could increase conversion by max. 7% by making flow more as ideal plug flow.

(b) $Pe = \frac{UL}{D_a}$ increasing L (reactor length) and proportionately decreasing diameter (to maintain V constant), would increase U and Pe

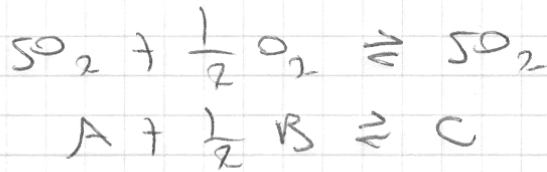
since $\sigma^2 \approx \frac{2\bar{U}^2}{Pe}$ this would decrease σ^2 and make flow pattern more ideal.

Üppgift 4

7.8% SO₂
10.8% O₂
81.4% N₂
825 K
F_{A0} = 10 mol/s



X_A = 0.5
Q = ? for minimum reactor size.



To minimize reactor size, reactor should operate at X = 0.5 on T. This gives reactor operating temp. of 875.1 K (see plot).

Heat balance for non-adiabatic reactor: (T = T_{re})

$$\sum F_{i0} \int_{T_{i0}}^T c_{p,i} dT + X_A F_{A0} \Delta H_R + Q = 0$$

$$F_{T0} = \frac{F_{A0}}{y_{A0}} = \frac{10}{0.078} = 128.2 \text{ mol/s}$$

$$F_{B0} = y_{B0} F_{T0} = 13.8 \text{ mol/s} \quad F_{N20} = y_{N20} F_{T0} = 104.4 \text{ mol/s}$$

then

$$Q = (F_{A0} c_{pA} + F_{B0} c_{pB} + F_{N20} c_{pN2}) (T_0 - T) - X_A F_{A0} \Delta H_R$$

solve for X = 0.5 and T = 875.1 K

$$Q = 2.84 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

$$= \underline{\underline{284 \text{ kW}}} \quad \leftarrow \text{ (A)}$$

Heat balance for adiabatic reactor:

$$\sum F_{i0} \int_{T_0}^T c_{p_i} dT + X_A F_{A0} \Delta H_R \neq 0$$

$$\left(c_{pA} + \frac{F_{B0}}{F_{A0}} c_{pB} + \frac{F_{N20}}{F_{A0}} c_{pN2} \right) (T - T_0) + X_A \Delta H_R = 0$$

$$420.06 (T - T_0) + 98.9 \cdot 10^3 X_A = 0$$

1) $T = 235.4 X_A + 825$

$$F_A = F_{A0} - X_A F_{A0}$$

$$F_B = F_{B0} - 0.5 X_A F_{A0}$$

$$F_C = X_A F_{A0}$$

$$F_{N2} = F_{N20}$$

$$F_{T05} = F_{T0} - 0.5 X_A F_{A0}$$

$$P_A = y_A P_{T05} = \frac{1 - X_A}{12.8 - 0.5 X_A} P_{T05}$$

$$P_B = y_B P_{T05} = \frac{1.38 - 0.5 X_A}{12.8 - 0.5 X_A} P_{T05}$$

$$P_C = y_C P_{T05} = \frac{X_A}{12.8 - 0.5 X_A} P_{T05}$$

$$K_p = \frac{P_C}{P_A P_B^{0.5}} = \exp\left(\frac{11300}{T} - 10.68\right)$$

$$2) \frac{X_A (12.8 - 0.5 X_A)^{0.5}}{(1 - X_A) (1.38 - 0.5 X_A)^{0.5}} P_{T05}^{-0.5} = \left(\exp \frac{11300}{T} - 10.68 \right)$$

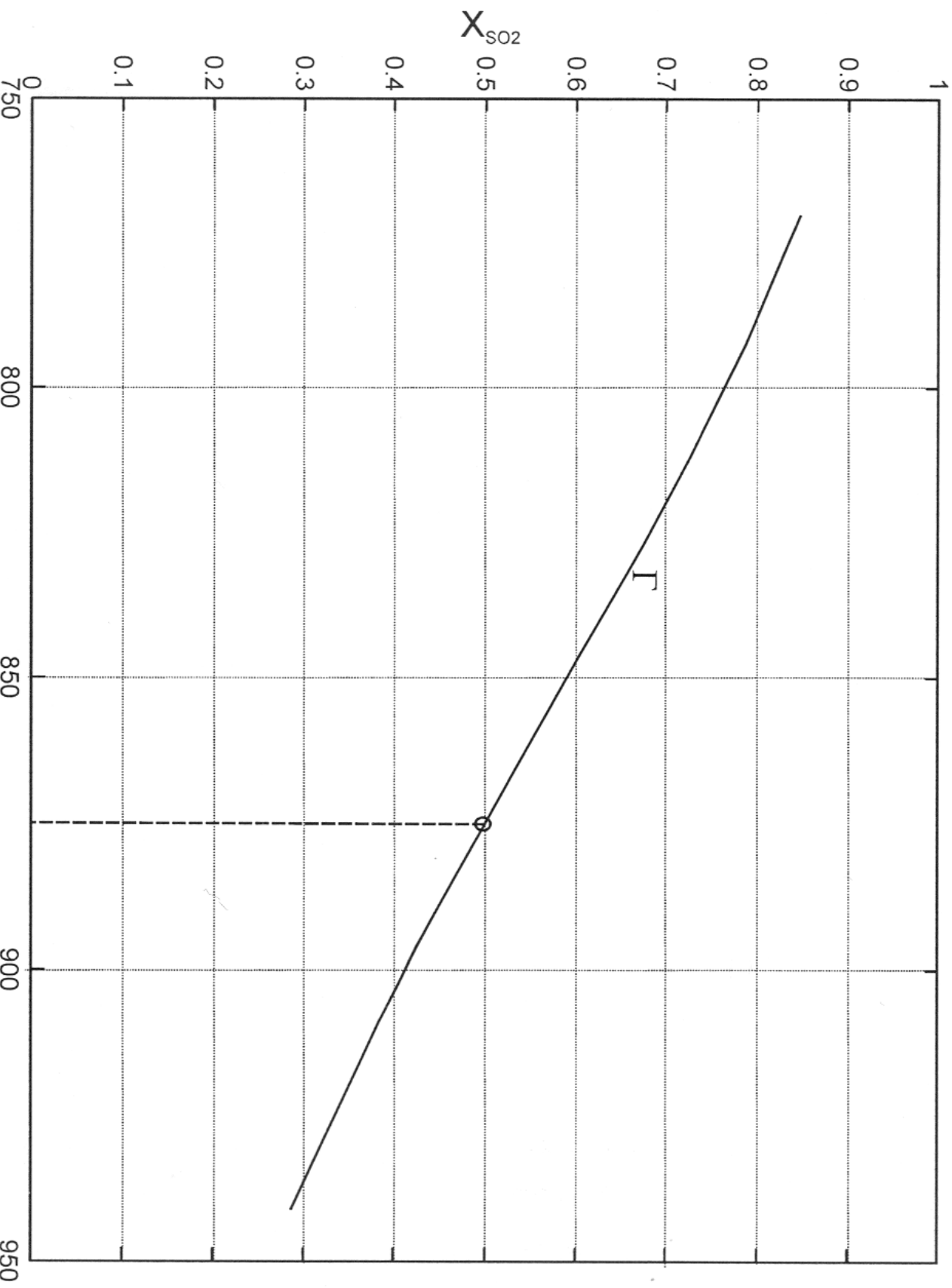
solve 1) and 2) for T and X_A

result $T = 946.26$

$X_A = 0.515$

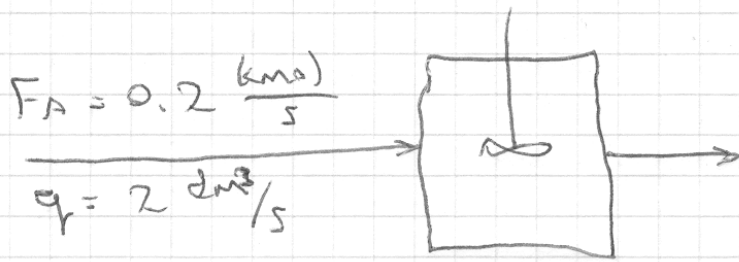
Adiabatic equilibrium conversion \leftarrow 1)

3/3



Üppg 5

1/3



$$m = 50 \text{ kg}$$
$$d_p = 10^{-3} \text{ m}$$
$$a = 4 \text{ m}^2/\text{kg}$$

liquid phase rea



1st order

$$k_1 = 1 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^3}{\text{kg} \cdot \text{s}}$$

$$k_2 = 6 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^3}{\text{kg} \cdot \text{s}}$$

negligible internal resistance. ($n=1$)

$Sh = 2$ since relative velocity zero of catalyst in fluid.

$$\text{yield of B} = \frac{F_B}{F_{A_0} - F_A} = ?$$

Mass. transport coeff:

$$k_{CA} = \frac{2 D_A}{d_p} = \frac{2 \left(5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \right)}{10^{-3} \text{ m}} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$$

$$k_{CB} = \frac{2 D_B}{d_p} = \frac{2 \left(2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \right)}{10^{-3} \text{ m}} = 4 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$$

mole balance for A:

$$F_{A_0} - q C_{A_0} - k_{CA} a m (C_{A_0} - C_{A_5}) = 0$$

$$k_{CA} a (C_{A_0} - C_{A_5}) = k_1 C_{A_5}$$

$$C_{A_5} = \frac{k_{CA} a}{k_{CA} a + k_1} C_{A_0} = 0.286 C_{A_0}$$

586 in reactor mole balance.

$$F_{A0} - q C_{A0} - k_{ca} m \left(1 - \frac{k_{ca} a}{k_{ca} a + k_1} \right) C_{A0} = 0$$

$$C_{A0} = \frac{F_{A0}}{q + k_{ca} m \left(1 - \frac{k_{ca} a}{k_{ca} a + k_1} \right)} = 58.3 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

$$F_A = q C_{A0} = 0.117 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

$$C_{A5} = 0.286 C_{A0} = 16.7 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

mole balance for B:

$$q C_{B0} = k_{cb} a m (C_{B5} - C_{B0})$$

$$k_1 C_{A5} - k_2 C_{B5} = k_{cb} a (C_{B5} - C_{B0})$$

$$C_{B5} = \frac{k_1 C_{A5} + k_{cb} a C_{B0}}{k_{cb} a + k_2}$$

sub in reactor mole balance for B:

$$q C_{B0} = k_{cb} a m \left(\frac{k_1 C_{A5} + k_{cb} a C_{B0}}{k_{cb} a + k_2} - C_{B0} \right)$$

$$q C_{B0} = \frac{m k_{cb} a k_1 C_{A5}}{k_{cb} a + k_2} + \frac{m k_{cb}^2 a^2}{k_{cb} a + k_2} C_{B0}$$

$$- m k_{cb} a C_{B0}$$

$$C_{B0} = \frac{\frac{m k_{cb} a k_1 C_{A5}}{k_{cb} a + k_2}}{q - \frac{m k_{cb}^2 a^2}{k_{cb} a + k_2} + m k_{cb} a} = 6.68 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

$$F_B = q V C_{B_0} = 0.0137 \text{ kmol/s}$$

$$\text{yield of B} = \frac{F_B}{F_{A_0} - F_A} = 0.161$$

(a) Yield of B is 16.1% \leftarrow

(b) if film transport resistance neglected.

mole balance for A:

$$F_{A_0} - q V C_A - k_1 C_A m = 0$$

$$C_A = \frac{F_{A_0}}{q + k_1 m} = 28.6 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

$$F_A = q V C_A = 0.057 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

mole balance for B:

$$q V C_B = m (k_1 C_A - k_2 C_B)$$

$$C_B = \frac{m k_1 C_A}{q + m k_2} = 28.6 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

$$F_B = q V C_B = 0.057 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

$$\text{yield of B} = \frac{F_B}{F_{A_0} - F_A} = 0.399$$

(c) Yield of B is 39.9% without transport resistance. \leftarrow