

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3 (KKR 100)**Fredagen den 13 april 2007 kl 8:30-12:30 i V****Examinator:** Derek Creaser

Derek Creaser (0702-283943) kommer att besöka tentamenslokalen ca. 9:30.
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 27 april 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

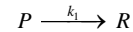
Kursbok, "Elements of Chemical Reaction Engineering"
Kompendium I KRT
KRT övningsbok
Lösta exempel

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

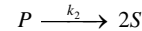
Poäng	Betyg
15-19	3
19.5-24	4
24.5-30	5

**Uppgift 1** (5 poäng)

Nedanstående vätskefasreaktion,



körs i en semi-batchreaktor. Den oönskade sidoreaktionen,



sker dock också samtidigt. Båda reaktionerna är av första ordningen med avseende på koncentrationen av P . Från början innehåller reaktorn 0.2 m^3 lösningsmedel utan något av vare sig reaktanten P eller produkterna R och S . En lösning innehållandes 5 kmol m^{-3} av P tillförs kontinuerligt reaktorn med ett flöde på $0.5 \text{ m}^3 \text{ min}^{-1}$. Ingen produktström tas ut från reaktorn, som i övrigt kan anses vara väl omrörd och vid konstant temperatur under hela processen.

- (a) Vad är koncentrationen av S i tanken efter 20 min?
(b) Vad är utbytet av R efter 20 min?

DATA:

$$k_1 = 0.23 \text{ min}^{-1}$$

$$k_2 = 0.07 \text{ min}^{-1}$$

$$\text{Utbyte av } R = \frac{\text{antal mol bildad } R}{\text{antal mol } P \text{ som reagerat}} \times 100\%$$

Uppgift 2 (5 poäng)

Jonas har en monolitreaktor där han utför katalytiska gasfasreaktioner. Monoliten har 80 kvadratiske parallella kanaler med innermåten $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ och med längden 10 cm . Medelhastigheten för gasen är 1.4 m s^{-1} . Reaktorn körs vid konstant tryck och temperatur (1 atm samt 400°C). Medelmolmassan av gasen är 40 kg kmol^{-1} . Jonas tänker modellera reaktorn som en serie idealt omrörda tankar. Hur många tankar bör modellen ha.
Tips: Du kan betrakta kanalerna som cylindriska med en tvärsnittarea som är samma som kanalens.

DATA:

$$\text{Gasens viskositet, } \mu \quad 10^{-5} \text{ Pa s}$$

$$\text{Reaktant (A) Molekylär Diffusivitet, } D_A \quad 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

Korrelation för dispersionskoefficienten (D) för laminärt flöde i ett rör med diameter (d_i):

$$D = D_A + \frac{u^2 d_i^2}{192 D_A} \quad \text{för } \text{Re} < 2300 \quad (\text{O. Levenspiel, Ind. Eng. Chem., 50 (1958) 343})$$

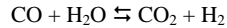
$$D = 0.4 u d_i \quad \text{för } \text{Re} > 40000$$

där u = medelhastigheten D = dispersionskoefficienten ρ = densitet

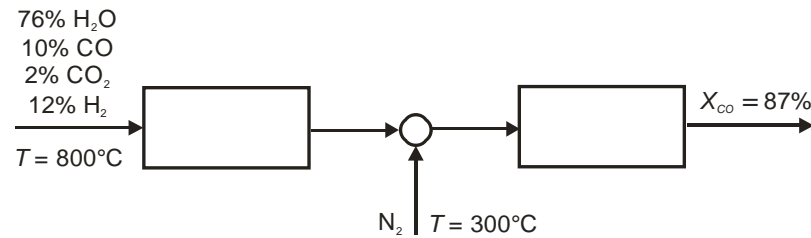
$$\text{Re} = \frac{d_i u \rho}{\mu} = \text{Reynolds tal}$$

Uppgift 3 (7 poäng)

Vid produktion av väte framställs först en blandning av CO, CO₂, H₂ och H₂O (i överskott) genom ångreformering av ett kolväte. I en efterföljande process ger den katalytiska vattengasskiftreaktionen ytterligare väte:



Sammanställningen av inflödesgasen till en vattengasskiftprocess är 76% H₂O, 10% CO, 2% CO₂ och 12% H₂. Processen består av två adiabatiska reaktorer i serie. Mellan reaktorerna tillsätts ren kvävgas med en temperatur på 300°C. I varje reaktor uppnås 90% av den adiabatiska jämviktsomsättningsgraden. Efter processen uppgår kolmonoxidomsättningen till 87%.



- Beräkna kvoten mellan hur många mol kvävgas som tillsätts processen och antalet mol vätegas som produceras.
- Visa (lämpligen med ekvationer) varför jämviktskurvan för CO-omsättningen (bifogad nedan) är oberoende av mängden tillsatt kvävgas. Under vilka omständigheter skulle en sådan graf bero på tillsatsen av en inert gas?

DATA:

Jämviktskonstanten för vattengasskiftreaktionen kan beräknas från

$$K_p = \exp\left(\frac{\Delta S}{R} - \frac{\Delta H}{RT}\right)$$

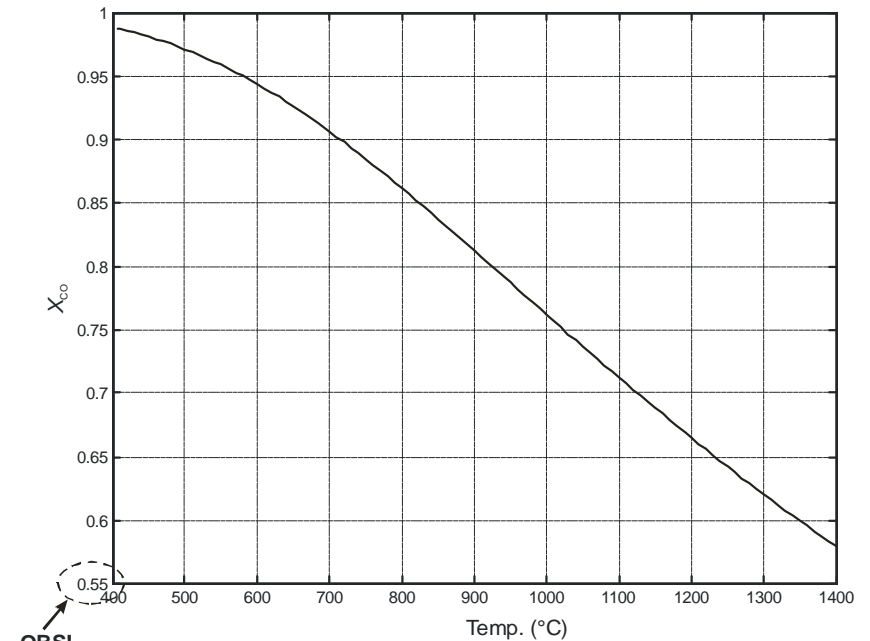
där $\Delta S = -30.2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ och $\Delta H = -40 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ vilka kan antas konstanta över det aktuella temperaturintervallet.

Molvärmen (oberoende av temperaturen):

Component	C_p (J mol ⁻¹ K ⁻¹)
H ₂ O	34
CO	29
CO ₂	37
H ₂	29
N ₂	31

se nästa sida...

Jämviktsomsättningsgraden av CO (X_{CO}) från 400 till 1400°C ges i grafen nedan:



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

Uppgift 4 (6 poäng)

När viskös majssirap värms, karamelliserar det (blir djupt mörkbrun). Om den värms för länge så bildas emellertid kolpartiklar.



Du är anställd på ett företag som producerar karamelliserat majssirap och levererar det till en läskedryckstillverkare som använder det vid framställning av en av sina produkter. Läskedryckstillverkaren testar regelbundet er produkts kvalitet. En svår avvägning mellan för långa och för korta reaktionstider måste göras. Om produkten är för ljus eller för mörk på grund av för många kolpartiklar refuseras den vilket är mycket dyrt för ditt företag.

För närvarande värms en batch med majssirap till 154°C i ett stort väl ombländat kar under en precis tidsrymd. Sedan töms det snabbt och kyls varefter karet måste rengöras noggrant (mycket arbetsintensivt) innan det fylls igen.

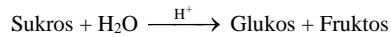
Ditt företag planerar reducera sina kostnader genom att ersätta denna dyra, arbetsintensiva batch-process med någon typ av kontinuerligt system.

- Vilken typ av kontinuerligt system vore bäst att använda? Varför? Ange några särskild viktiga aspekter i designen.
- Finns det några potentiella problem med det föreslagna kontinuerliga systemet som skulle göra det mindre lämpligt än det nuvarande systemet.

Underbygg dina svar genom att hänvisa till viktiga principer inom kemisk reaktionsteknik.

Uppgift 5 (7 Points)

Sukros "inverteras" i närvaro av vätejoner till glukos och fruktos. Reaktionen kan uttryckas som:



Reaktionen körs i en bädd av jon-bytt material som katalyserar reaktionen. Reaktionen är av första ordningen med avseende på sukros-koncentrationen, så reaktionshastigheten kan uttryckas som:

$$-r_{\text{sukrose}} = kC_{\text{sukrose}}$$

En packad bädd med jon-bytt material matas med en sukros-lösning av concentrationen 1 kmol m^{-3} . Inflödet är $5.54 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Den tub-formade bädden har volymen 0.3 m^3 , längden 1.98 m samt innehåller sfäriska pellets av poröst jon-bytt material med diametern (d_p) 5 mm . Omsättningen av suktor över bädden är 85% . Reaktorn körs isotermt och man kan anta idealt pluggflöde genom reaktorn.

- Ta hänsyn till både externt (film-) transportmotstånd och internt (por-) transportmotstånd och bestäm k för inverteringen av sukros i enheter av m^3 lösning per m^3 katalysator och sekund.
- Är både det externa (film-) transportmotståndet och det interna (por-) transportmotståndet signifikant för betingelserna ovan? Motivera ditt svar med beräkningar.

DATA:

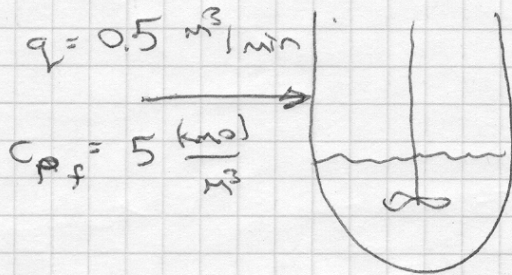
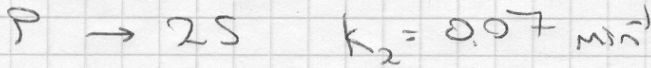
Bäddporositet	$\varepsilon = 0.3$
Effektiv diffusivitet av sukros i partiklarna	$D_e = 8.0 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Lösningens densitet	$\rho = 1 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}$
Lösningens viskositet	$\mu = 1 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Diffusivitet av sukros i lösningen	$D = 9.0 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Följande samband mellan Sh , Re och Sc kan antas gälla:

$$Sh = 1.8 \left(\frac{ud_p \rho}{\mu} \right)^{0.5} Sc^{1/3}$$

där u är den linjära flödes hastigheten i en tom reaktor.

UAPgift 1



$C_S = ?$
 $Y_R = ?$ after 20 min

$$V = V_0 + qt$$

$$V_0 = 0.2 \text{ m}^3$$

$$C_{P_0} = 0 \text{ at } t = 0$$

mole balance for P:

$$\frac{dN_P}{dt} = qC_{P_f} - (k_1 + k_2)C_P V$$

$$\frac{dN_P}{dt} = qC_{P_f} - (k_1 + k_2)N_P$$

$$\int_0^t dt = \int_0^{N_P} \frac{dN_P}{qC_{P_f} - (k_1 + k_2)N_P}$$

$$t = -\frac{1}{k_1 + k_2} \left[\ln (qC_{P_f} - (k_1 + k_2)N_P) \right]_0^{N_P}$$

$$t = -\frac{1}{k_1 + k_2} \ln \left(\frac{qC_{P_f} - (k_1 + k_2)N_P}{qC_{P_f}} \right)$$

$$N_P = \frac{qC_{P_f}}{k_1 + k_2} (1 - \exp(-(k_1 + k_2)t))$$

mole balance for R:

$$\frac{dN_R}{dt} = k_1 C_P V = k_1 N_P$$

$$\int_0^{N_R} dN_R = k_1 \int_0^t N_P dt$$

$$N_R = \frac{k_1 q C_{PF}}{k_1 + k_2} \int_0^t (1 - \exp(-(k_1 + k_2)t)) dt$$

$$N_R = \frac{k_1 q C_{PF}}{k_1 + k_2} \left[t + \frac{1}{k_1 + k_2} \exp(-(k_1 + k_2)t) \right]_0^t$$

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

$$N_S = (q C_{PF} t - N_R - N_P) * 2$$

at $t = 20 \text{ min}$

$N_P = 8.31 \text{ kmol}$

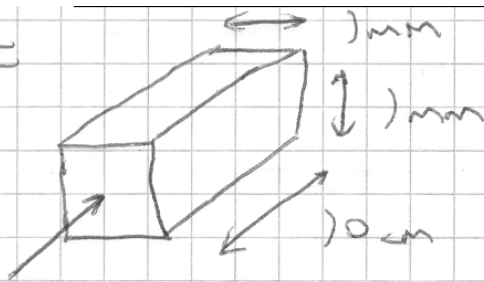
$N_R = 31.96$

$N_S = 9.73 * 2 = 19.46 \text{ kmol}$

$$C_S = \frac{N_S}{V_0 + q t} = 1.91 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \quad \leftarrow \text{a)}$$

$$Y_R = \frac{N_R}{q C_{PF} t - N_P} * 100\% = 76.7\% \quad \leftarrow \text{b)}$$

Oppgitt 2



$$u = 1.4 \text{ m/s}$$

$$A_c = \frac{1 \text{ mm}^2}{\left(\frac{1}{10^3} \text{ mm}\right)^2} = 1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2$$

for tube $A_c = \frac{\pi d_f^2}{4}$

then $d_f = \sqrt{\frac{4 A_c}{\pi}} = 1.1 \cdot 10^{-3} \text{ m}$

$$\rho = \frac{\text{mol} \cdot k}{8.314 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3} \cdot \frac{101325 \text{ Pa}}{400 + 273 \text{ K}} \cdot \frac{40 \text{ kg}}{\text{kmol}} \cdot \frac{\text{kmol}}{10^3 \text{ mol}} = 0.724 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$Re = \frac{1.1 \cdot 10^{-3} \text{ m}}{10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}} \cdot \frac{1.4 \text{ m}}{5} \cdot \frac{0.724 \text{ kg}}{\text{m}^3} = 111.5$$

then $D = D_A + \frac{u^2 d_f^2}{192 D_A}$ applies

$$\text{then } D = 10^{-6} + 0.0124 = 1.24 \cdot 10^{-2} \frac{\text{m}^2}{5}$$

$$Pe = \frac{uL}{D} = \frac{1.4 \text{ m}}{5} \cdot \frac{0.1 \text{ m}}{1.24 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2} = 11.29$$

assume closed-closed boundary conditions:

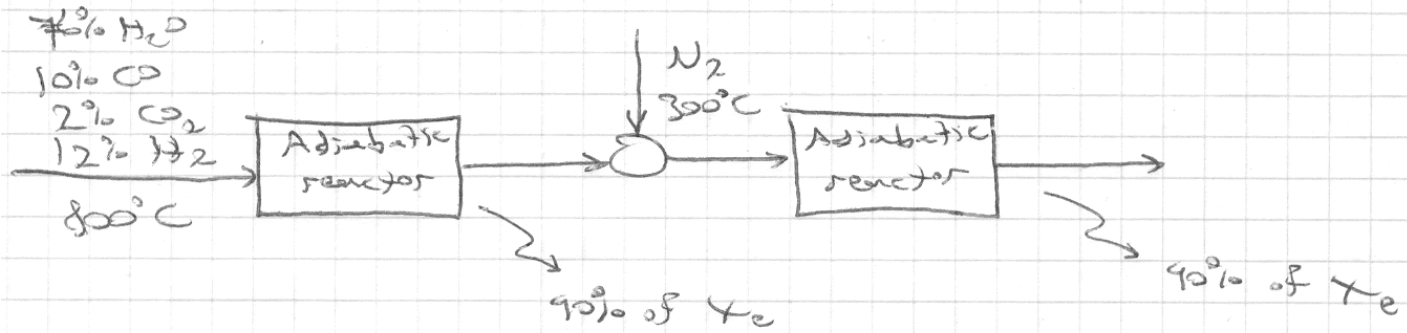
$$\frac{\sigma^2}{T_m^2} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} (1 - \exp(-Pe))$$

$$\frac{\sigma^2}{T_m^2} = 0.1615$$

$$n = \frac{T_m^2}{\sigma^2} = 6.19 \text{ tubes in series.}$$

uppgift 3

1/3



Basis: 100 mol of feed gas

O.L. for first reactor:

$$\sum F_{i0} \int_{T_0}^{T_1} C_{p_i} dT + X_1 F_{\text{CO}}^0 \Delta H_R = 0$$

$$\left[C_{p_{\text{CO}}} + \frac{F_{\text{H}_2\text{O}}^0}{F_{\text{CO}}^0} C_{p_{\text{H}_2\text{O}}} + \frac{F_{\text{CO}_2}^0}{F_{\text{CO}}^0} C_{p_{\text{CO}_2}} + \frac{F_{\text{H}_2}^0}{F_{\text{CO}}^0} C_{p_{\text{H}_2}} \right] (T_1 - T_0) + X_1 (-40 \cdot 10^3) = 0$$

$$\left[29 + \frac{76}{10} 34 + \frac{2}{10} 37 + \frac{12}{10} 29 \right] T_1 - T_0 = 40 \cdot 10^3 X_1$$

$$T_1 - T_0 = 121.4 X_1$$

from plotting O.L. in plot:

$$T_{1\text{eq}} = 899^\circ\text{C} \quad X_{1\text{eq}} = 0.81$$

$$\text{then } X_1 = 0.9 (X_{1\text{eq}}) = 0.73 \quad \text{and } T_1 = 888.6^\circ\text{C}$$

for 2nd reactor $X_2 = 0.87$

$$X_{2\text{eq}} = \frac{X_2}{0.9} = 0.967$$

$$\text{and } T_{2\text{eq}} = 518^\circ\text{C}$$

	Feed (mol/s)	F' (mol/s)
H ₂ O	76	76 - 10(0.73) = 68.7
CO	10	10(1 - 0.73) = 2.7
CO ₂	2	2 + 10(0.73) = 9.3
H ₂	12	12 + 10(0.73) = 19.3

O.L. for 2nd reactor:

$$\sum F'_i \int_{T_{20}}^{T_2} c_{p,i} dT + F'_{CO} (X_2 - X_1) \Delta H_R = 0$$

$$\left[\frac{F'_{CO}}{F'_{CO}} c_{p,CO} + \frac{F'_{H_2O}}{F'_{CO}} c_{p,H_2O} + \frac{F'_{CO_2}}{F'_{CO}} c_{p,CO_2} + \frac{F'_{H_2}}{F'_{CO}} c_{p,H_2} + \frac{F_{N_2}}{F'_{CO}} c_{p,N_2} \right]$$

$$(T_2 - T_{20}) = 40 \cdot 10^3 (X_2 - X_1)$$

$$\left[\frac{2.7}{10} 29 + \frac{68.7}{10} 34 + \frac{9.3}{10} 37 + \frac{19.3}{10} 29 + \frac{F_{N_2}}{10} 31 \right]$$

$$(T_2 - T_{20}) = 40 \cdot 10^3 (X_2 - X_1)$$

$$(1) (331.8 + 0.31 F_{N_2}) (T_2 - T_{20}) = 40 \cdot 10^3 (X_2 - X_1)$$

Heat Balance for mixing:

$$\sum F'_i \int_{T_1}^{T_{20}} c_{p,i} dT + F_{N_2} \int_{T_f}^{T_{20}} c_{p,N_2} dT = 0$$

$$(2.7(29) + 68.7(34) + 9.3(37) + 19.3(29))(T_{20} - T_1)$$

$$+ 31 F_{N_2} (T_{20} - T_f) = 0$$

$$331.8 (T_{20} - T_1) + 31 F_{N_2} (T_{20} - T_f) = 0$$

$$(2) F_{N_2} = 107 \left(\frac{T_{20} - 888.6}{300 - T_{20}} \right)$$

Sub (2) in (1)

$$\left[331.8 + 33.18 \left(\frac{T_{20} - 888.6}{300 - T_{20}} \right) \right] (T_2 - T_{20}) = 40 \cdot 10^3 (X_2 - X_1)$$

Sub in X₁, T_{2eq} and X_{2eq} to get T₂₀

$$\left[331.8 + 33.18 \left(\frac{T_{20} - 888.6}{300 - T_{20}} \right) \right] (518 - T_{20}) = 9480$$

solving $T_{20} = 494.3^\circ\text{C}$

then $F_{N_2} = 107 \left(\frac{494.3 - 888.6}{300 - 494.3} \right)$
 $= 217.1 \text{ mol}_{15}$

$$F_{H_2}^2 = 12 + 10(0.87) = 20.7 \text{ mol}_{15}$$

(a) $\frac{F_{N_2}}{F_{H_2}^2} = \frac{217.1}{20.7} = 10.5$ Nitrogen feed per total H_2 produced.

$$F_{H_2 \text{ produced}} = 10(0.87) = 8.7 \text{ mol}_{15}$$

(a) $\frac{F_{N_2}}{F_{H_2 \text{ prod.}}} = \frac{217.1}{8.7} = 25.0$ Nitrogen feed per H_2 produced over reactors.

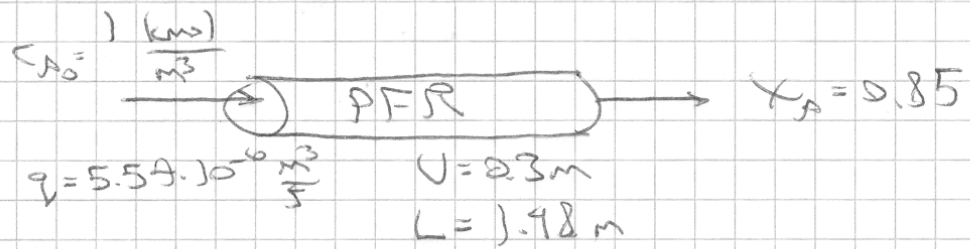
For this reaction $k_p = \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{P_O P_{H_2O}}$
 $= \frac{y_{CO_2} y_{H_2}}{y_O y_{H_2O}}$ (independent of P_{tot})

for flow reactors $y_i = \frac{F_i}{F_{tot}}$

so $k_p = \frac{F_{CO_2} F_{H_2}}{F_O F_{H_2O}}$ (independent of F_{tot})

so equilibrium is independent of F_{tot} and thus unaffected by quantity of inerts (N_2) since the reaction has no total mole change. If there were a mole change due to reaction k_p would depend on F_{tot} and N_2 concentration. (b)

Uppgift 5



$$Sc = \frac{\mu}{\rho D} = 1.11 \cdot 10^4$$

$$A_c = \frac{V}{L} = \frac{0.3}{1.98} = 0.15 \text{ m}^2$$

$$u = \frac{q}{A_c} = \frac{5.54 \cdot 10^{-6}}{0.15} = 3.69 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$$

$$k_c = 1.8 \frac{D}{d_p} \left(\frac{u d_p \rho}{\mu} \right)^{0.5} Sc^{1/3} = 3.09 \cdot 10^{-7} \text{ m/s}$$

$$S_p = \frac{6}{d_p} = 1200 \frac{\text{m}^2 \text{ cat.}}{\text{m}^3 \text{ cat.}}$$

$$S_v = \frac{6}{d_p} (1 - \epsilon) = 840 \frac{\text{m}^2 \text{ cat.}}{\text{m}^3 \text{ reactor}}$$

mole balance: $A + H_2O \rightarrow \text{products}$

$$q \frac{dc_A}{dV} = -k_c (c_A - c_{A_s}) S_v \quad (1)$$

also $S_p k_c (c_A - c_{A_s}) = m k c_{A_s}$

$$c_{A_s} = \frac{S_p k_c}{S_p k_c + m k} c_A \quad (2)$$

combine (1) and (2)

$$q \frac{dc_A}{dV} = -S_v k_c c_A \left(1 - \frac{S_p k_c}{S_p k_c + m k} \right)$$

$$V = \frac{-q}{S_v k_c \left(1 - \frac{S_p k_c}{S_p k_c + m k} \right)} \int_{c_{A0}}^{c_A} \frac{dc_A}{c_A}$$

$$1 - \frac{S_p k_c}{S_p k_c + m k} = - \frac{q}{S_v k_c V} \ln(1 - X)$$

$$m k = \frac{S_p k_c}{1 + \frac{q}{S_v k_c V} \ln(1 - X)} - S_p k_c$$

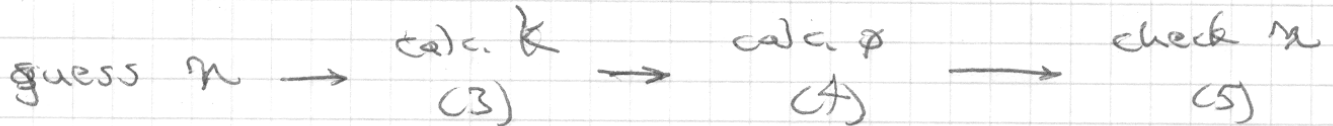
$$m_k = 5.786 \cdot 10^{-5} \quad (3)$$

2/2

$$\phi = \frac{d_p}{2} \sqrt{\frac{k}{D_e}} \quad (4)$$

$$m = \frac{3}{\rho} \left(\frac{1}{\text{tank } \phi} - \frac{1}{\phi} \right) \quad (5)$$

solve for k from (3), (4) and (5)



m	k (s^{-1})	ϕ	m
0.5	$1.15 \cdot 10^{-4}$	9.51	0.282
0.282	$2.05 \cdot 10^{-4}$	12.65	0.218
0.218	$2.85 \cdot 10^{-4}$	14.39	0.194
0.194	$2.98 \cdot 10^{-4}$	15.26	0.183
0.183	$3.15 \cdot 10^{-4}$	15.69	0.179
0.179	$3.23 \cdot 10^{-4}$	15.89	0.176
0.176	$3.27 \cdot 10^{-4}$	15.98	0.176
0.176	$3.29 \cdot 10^{-4}$	16.03	0.176

converged at $k = 3.29 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ \leftarrow (calc)

$$m = 0.176$$

$$C_{A_s} = \frac{S_p k_c}{S_p k_c + m k} C_A$$

$$C_{A_s} = 0.865 C_A$$

External transport resistance rather small since only small ~~diff.~~ external conc. gradient, but internal resistance is larger, reaction rate \leftarrow (6)
is only 17.6% than at surface conditions (C_{A_s}).