

**Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3 (KKR 100)****Fredagen den 31 augusti 2007 kl 8:30-12:30 i M****Examinator:** Derek Creaser

Derek Creaser (0702-283943) kommer att besöka tentamenslokalen ca. 9:30 och 11:00.  
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 14 september 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)

Följande två irreversibla gasfasreaktioner utföres i en väl omblandad adiabatisk tankreaktor:



Den 100 dm<sup>3</sup> stora tankreaktorn arbetar vid konstant tryck och en konstant temperatur på 180°C (dvs. samma temperatur i in- och utflöde). Reaktorinflödet består av endast A och B och produktionshastigheten av R är 100 mol s<sup>-1</sup>. Vilka molära inflödes hastigheter av A och B erfordras för att få en omsättningsgrad av A på 90%?

DATA:

 $k_1 = 0.25 \text{ s}^{-1}$  och  $k_2 = 0.1 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , båda vid 180 °C
**Uppgift 2** (5 poäng)

En industri släpper ut en förorening via en 600 m lång ledning med diametern 1 m. Föroreningen sönderfaller enligt en första ordningens reaktion i ledningen. Uppehållstidsfördelningen har bestämts vid ett pulsförsök. En puls av ett spårämne tillsattes vid inloppet på röret och svaret uppmättes vid 2 olika ställen belägna 100 m ifrån varandra.

Följande resultat erhöles:

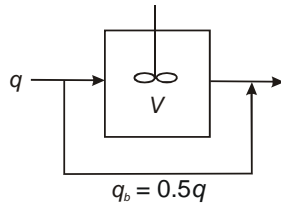
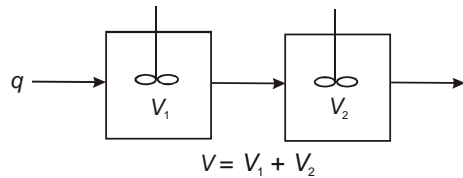
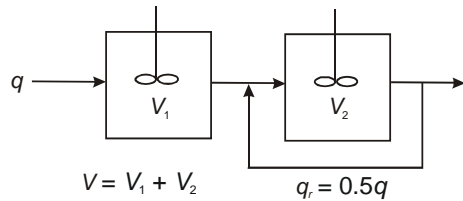
Mätställe	1	2
Medeluppehållstid (s)	4	7.5
Varians $\sigma^2$ (s <sup>2</sup> )	0.25	0.48

Beräkna halten av föroreningen i utflödet då halten i inflödet är 0.2 kmol m<sup>-3</sup> och hastighetskonstanten ( $k$ ) är 0.1 s<sup>-1</sup>.

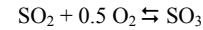


Uppgift 3 (7 poäng)

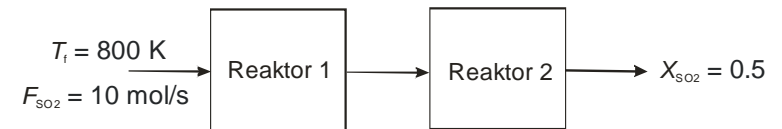
En ideal tankreaktor med volymen  $V \text{ m}^3$  körs med ett vätsketillflöde på  $q \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ . Skissera uppehållstidsfördelningen ( $E(t)$ ) för denna reaktor. Skissera också uppehållstidsfördelningarna för följande konfigurationer av ideala tankreaktorer och beskriv hur de kvalitativt skiljer sig från fallet med en enda tankreaktor.

Fall AFall BFall CUppgift 4 (7 poäng)

Den katalytiska och jämviktsbegränsade oxidationen av svaveldioxid:



skall utföras i två stycken serieskopplade fluidiserade adiabatiska bäddreaktorer utan mellankylning. De fluidiserade bäddarna kan antas fungera som ideala tankreaktorer. Inflödet till den första reaktor består av 7.8%  $\text{SO}_2$ , 10.8%  $\text{O}_2$  and 81.4%  $\text{N}_2$  vid 800 K. Molflödet av  $\text{SO}_2$  i inloppet är totalt 10 mol/s. Konturlinjerna för reaktionshastigheten som funktion av svaveldioxidens omsättningsgrad och temperatur, har beräknats och plottats i figuren nedan. I utflödet från den andra reaktor skall omsättningsgraden för  $\text{SO}_2$  vara 50%.



- Beräkna den minsta möjliga sammanlagda katalysatormängden för de båda reaktorerna samt omsättningsgraden för  $\text{SO}_2$  efter den första reaktor.
- Blir katalysatormängden större eller mindre än den totala katalysatormängden i (a) om de fluidiserade bäddreaktorerna ersätts med en enda tubreaktor med packad bädd. Motivera svaret.

DATA:

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

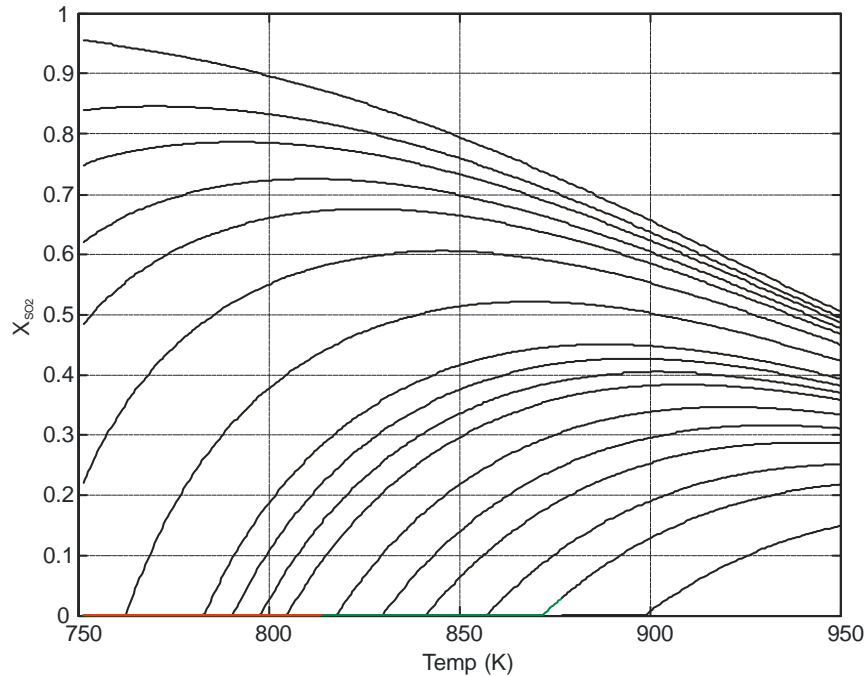
Molvärmen (oberoende av temperaturen):

Komponent	$C_p \text{ (J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{)}$
$\text{SO}_2$	51
$\text{O}_2$	33
$\text{SO}_3$	71
$\text{N}_2$	31

(forts...)

## Uppgift 4 (forts...)

Konturlinjer för reaktionshastigheten som funktion av SO<sub>2</sub> - omsättningsgraden ( $X_{SO_2}$ ) och temperaturen:



Konturlinjerna i plotten ovan gäller för följande reaktionshastigheter:

Reaktionshastighet ( $\text{mol} \cdot (\text{kg} \cdot \text{kat})^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ )

0; 4; 7; 11; 15; 22; 33; 45; 50; 55; 60; 70; 80; 90; 105; 120; 150

**Obs:** Om du använder grafen 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 poäng)

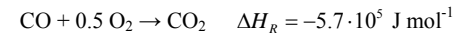
En bilavgasrenare (catalytic converter) består av en sk monolitkatalysator med parallella kanaler med kvadratisk tvärsnitt. Katalysatormaterialet är placerat i ett tunt skikt (washcoat) på kanalens väggar. Beräkna väggens temperatur 5 cm från inloppet. I denna punkt består gasfasen av bland annat 1% CO och 8% O<sub>2</sub> vid 450°C och 1 bar. Antag att masstransporten genom den yttre filmen är helt hastighetsbestämmande.

Massöverförings- och värmeöverföringskoefficienten i filmen kan beräknas från

$$Nu = Sh = 0.87 \left( \frac{d_i}{x} \right)^{1/3} \cdot (Re \cdot Sc)^{1/3}$$

$$\text{med } Nu = \frac{hd_i}{\lambda} \text{ och } Sh = \frac{k_c d_i}{D}$$

där  $d_i$  är kanalsidan och  $x$  avståndet från inloppet. Reaktionen är



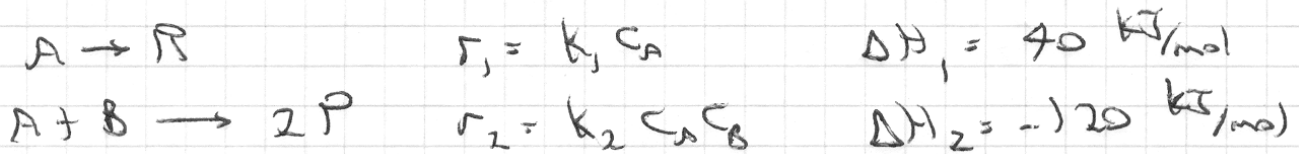
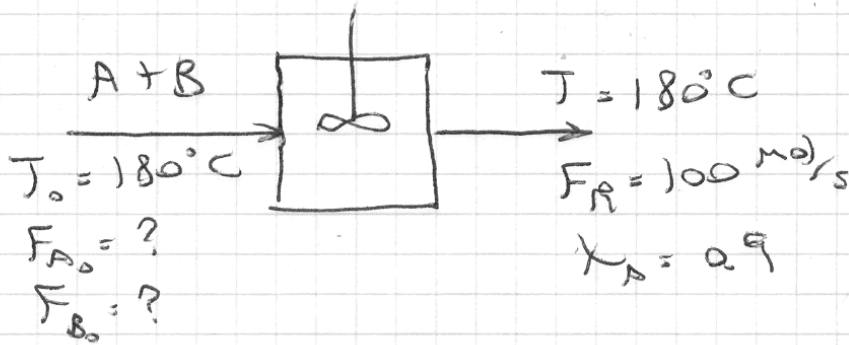
Gasens volymsändring pga reaktionen kan försummas.

DATA:

Kanalsida	$d_i = 0.0015 \text{ m}$
Gasens densitet	$\rho = 0.48 \text{ kg m}^{-3}$
Gasens viskositet	$\mu = 3.3 \cdot 10^{-5} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Diffusivitet för CO	$D_{CO} = 6.2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Diffusivitet för O <sub>2</sub>	$D_{O_2} = 6.8 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Gasens värmeledningstal	$\lambda = 0.05 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$

# Uppgift 1

1/2



$$A: \quad X_A F_{A_0} = (k_1 C_A + k_2 C_A C_B) V \quad (1)$$

$$R: \quad F_R = k_1 C_A V \quad (2)$$

$$B: \quad F_{B_0} - F_B = k_2 C_A C_B V \quad (3)$$

$$\text{Temp:} \quad \text{if } T_0 = T \text{ then } r_1 \Delta H_1 = r_2 (-\Delta H_2)$$

$$k_1 C_A \Delta H_1 = k_2 C_A C_B (-\Delta H_2)$$

$$C_B = \frac{k_1 \Delta H_1}{k_2 (-\Delta H_2)} = \frac{0.25 \text{ mol/s}}{0.5 \text{ dm}^3} \frac{40}{120}$$

$$C_B = 0.83 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$\text{from (2)} \quad C_A = \frac{F_R}{k_1 V} = \frac{100 \text{ mol/s}}{0.25 \cdot 100 \text{ dm}^3}$$

$$C_A = 4 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$\text{from (1)} \quad F_{A_0} = \frac{(k_1 C_A + k_2 C_A C_B) V}{X_A}$$

$$F_{A_0} = \frac{[0.25(4) + 0.5(4)(0.83)] 100}{0.9}$$

$$F_{A_0} = 148 \text{ mol/s}$$

2/2

From (3)  $F_{B_0} = k_2 C_A C_B U + q C_B$

since no stoichiometric changes and  $T_0 = T$   
then  $q_0 = q$ !

$$F_A = F_{A_0} (1 - X_A) = 14.8 \text{ mol/s}$$

$$q = \frac{F_A}{C_A} = \frac{14.8 \text{ mol/s}}{4 \text{ mol/dm}^3} = 3.7 \frac{\text{dm}^3}{\text{s}}$$

$$F_{B_0} = (0.1)(4)(0.83)(100) + 3.7(0.83)$$

$$F_{B_0} = 36.3 \text{ mol/s}$$

$$F_{A_0} = 14.8 \text{ mol/s}$$

$$F_{B_0} = 36.3 \text{ mol/s}$$

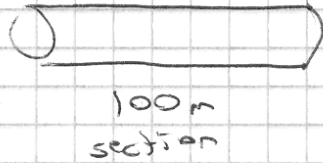


## Üppgift 2

1/2

$$\bar{T} = 4 \text{ s}$$

$$\sigma^2 = 0.25$$



$$\bar{T} = 7.5$$

$$\sigma^2 = 0.48$$

over 100 m section:

$$\bar{T} = \bar{T}_2 - \bar{T}_1 = 3.5 \text{ s}$$

$$\sigma^2 = \sigma_2^2 - \sigma_1^2 = 0.23 \text{ s}^2$$

$$q = \frac{100 \text{ m}}{3.5} \pi \frac{d^2}{4} = 22.4 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

$$\frac{\sigma^2}{L} = 2.3 \cdot 10^{-3} \text{ s}^2$$

$$u = 28.57 \text{ m/s}$$

(first section  $L_1 = 114.3 \text{ m}$   $\frac{\sigma_1^2}{L_1} = 2.2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^2$ )

$$\frac{\sigma^2}{L} \approx \frac{\sigma_1^2}{L_1} \text{ so variance per length is rather constant.}$$

so for entire 600 m pipe

$$\sigma_{\text{tot}}^2 = (2.3 \cdot 10^{-3} \text{ s}^2) (600) = 1.38 \text{ s}^2$$

$$\bar{T}_{\text{tot}} = \frac{3.5 \text{ s}}{100} (600 \text{ m}) = 21 \text{ s}$$

for closed-closed vessel:

$$\frac{\sigma^2}{\bar{T}^2} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} (1 - \exp(-Pe)) = 3.1 \cdot 10^{-3}$$

solving  $Pe = 644.2$

$$Da = \frac{kL}{u} = \frac{0.1}{s} \left| \frac{600 \text{ m}}{28.57 \text{ m/s}} \right| = 2.1$$

$$q = \sqrt{1 + 4 \frac{Da^2}{Pe}} = 1.0065$$

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

$$1 - X = 0.1233$$

$$Y = 0.8777$$

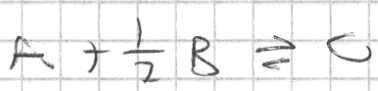
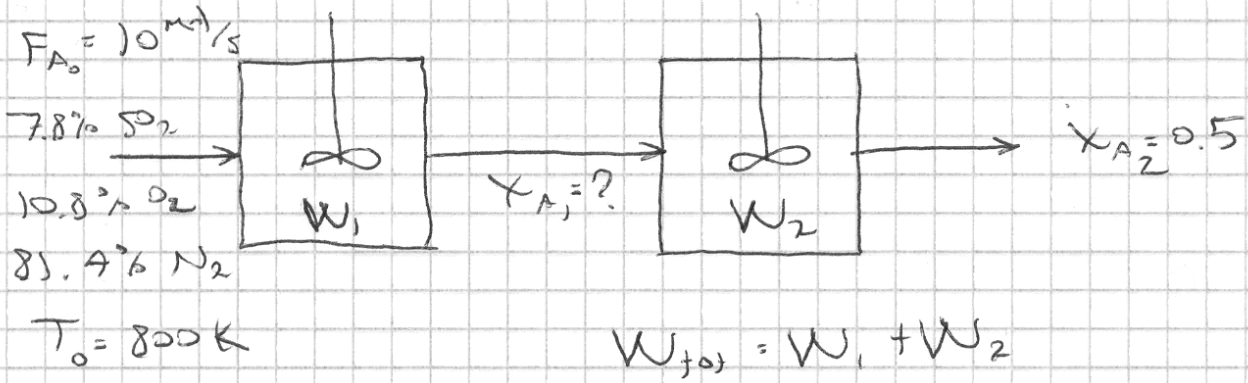
$$C_{A0} = 0.2 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

$$C_A = C_{A0}(1 - Y)$$

$$C_A = 0.025 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \quad \leftarrow$$

# Uppgift 4

Adiabatic tank reactors:



$\min(W_{\text{tot}}) = ?$

$F_{T_0} = \frac{F_{A_0}}{y_{A_0}} = \frac{10}{0.078} = 128.2 \text{ mol/s}$

$F_{B_0} = y_{B_0} F_{T_0} = 13.8 \text{ mol/s}$

$F_{N_2_0} = y_{N_2} F_{T_0} = 104.4 \text{ mol/s}$

Adiabatic reactor heat balance:

$\sum F_{i_0} \int_{T_0}^T c_{p,i} dT + X_A F_{A_0} \Delta H_R = 0$

$(c_{pA} + \frac{F_{B_0}}{F_{A_0}} c_{pB} + \frac{F_{N_2}}{F_{A_0}} c_{pN_2}) (T - T_0) + X_A \Delta H_R = 0$

$420.26 (T - T_0) - 98.9 \cdot 10^3 X_A = 0$

3  $T = 235.4 X_A + 800 \text{ (o.k.)}$

Plot (1) in graph with rate contour lines, can see that at  $X_{A_2} = 0.5$ ,  $-r_{A_2} \approx 27.5 \text{ mol/kg.s}$

To minimize catalyst mass first reactor should operate at max. reaction on o.k. between  $X_A = 0$  and  $X_A = 0.5$

This is at  $X_{A_1} \approx 0.22$  where  $-r_{A_1} \approx 70 \text{ mol/kg.s}$

so  $X_{A_1} = 0.22$   $-r_{A_1} = 70 \text{ mol/kg.s}$



mole balance 1st reactor:

$$X_{A1} F_{A0} = W_1 (-r_{A1})$$

$$W_1 = \frac{0.22 (10 \text{ mol/s}) (60 \text{ s/min}) (60 \text{ min/h})}{70 \frac{\text{mol}}{\text{kg} \cdot \text{h}}}$$

$$W_1 = 113.1 \text{ kg}$$

mole balance 2nd reactor:

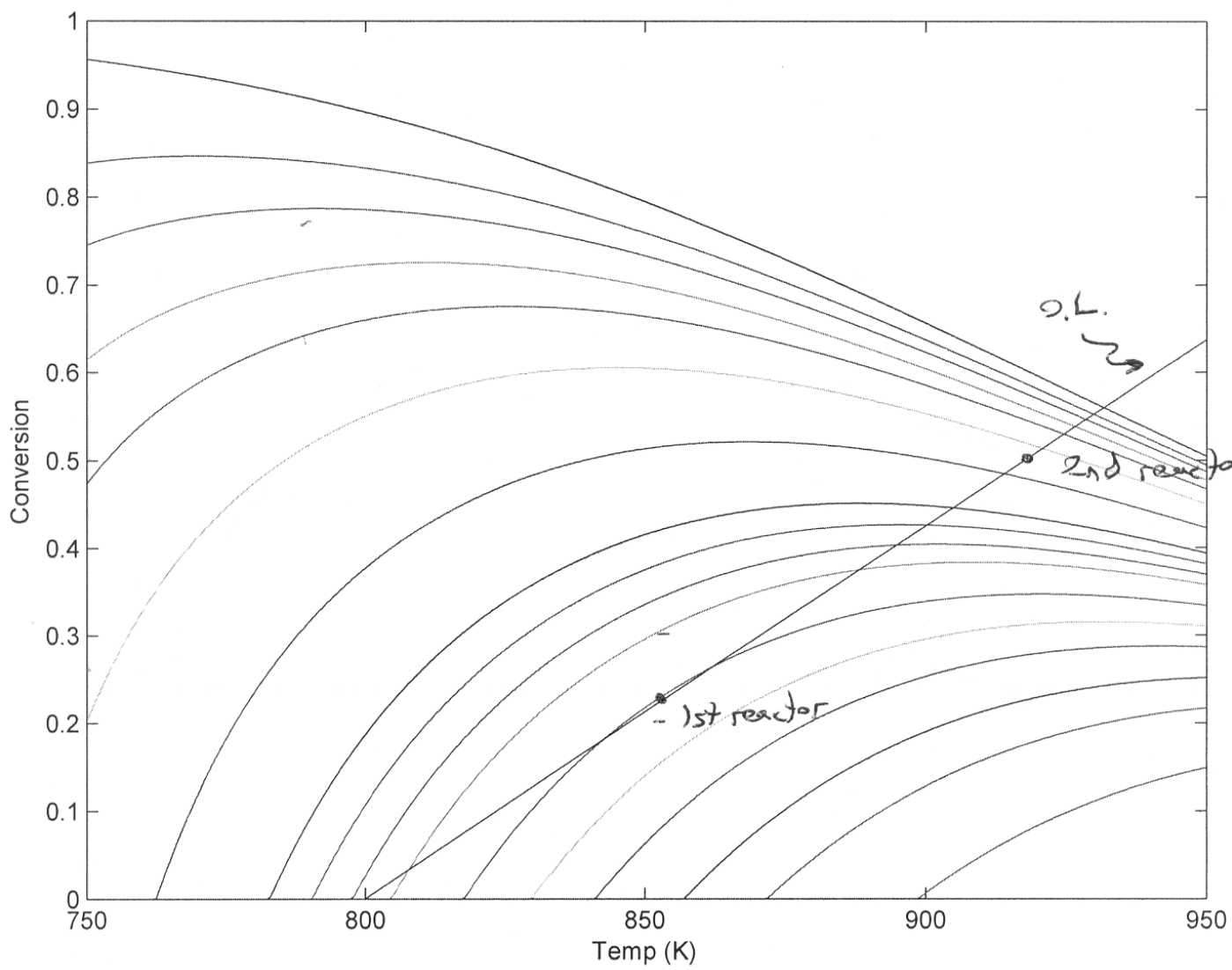
$$(1 - X_{A1}) F_{A0} - (1 - X_{A2}) F_{A0} = W_2 (-r_{A2})$$

$$W_2 = \frac{(0.5 - 0.22) (10) (60) (60)}{27.5}$$

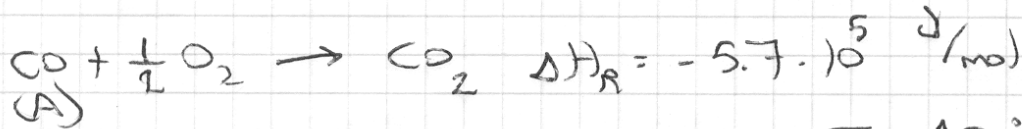
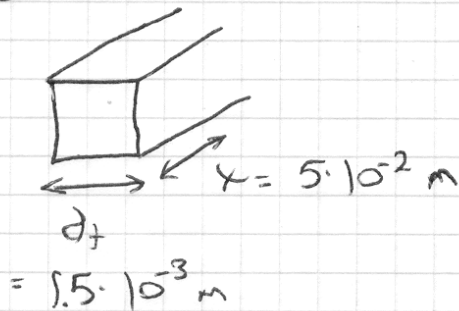
$$W_2 = 366.5 \text{ kg}$$

$$W_{\text{tot}} = W_1 + W_2 = 479.6 \text{ kg}$$

$$X_{A1} = 0.22$$



Uppgift 5



$T_s = ?$  where  $y_A = \frac{1}{100}$  ,  $T = 450^\circ\text{C} =$   
 $P = 1 \text{ bar}$

Assume gas phase transport completely limits reaction.

then  $C_{A_s} = 0$

mass:  $a k_c C_A = r_A$

2 heat:  $-ah(T - T_s) = r_A(-\Delta H_R)$

2 so  $k_c C_A (-\Delta H_R) = -h(T - T_s)$  (1)

$Nu = Sh = 0.87 \left( \frac{d_t}{K} \right)^{1/3} \cdot (Re \cdot Sc)^{1/3}$

$Nu = \frac{h d_t}{\lambda}$        $Sh = \frac{k_c d_t}{D_A}$

then  $\frac{k_c}{h} = \frac{D_A}{\lambda} = \frac{47 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}}{0.05 \frac{\text{W}}{\text{mK}}}$

$= 1.2 \cdot 10^3$

$C_A = y_A \frac{P}{RT} = \frac{1}{100} \frac{1 \text{ bar} | 10^5 \text{ Pa}}{1 \text{ bar} | (450 + 273) \text{ K}} \frac{\text{mol K}}{8.314 \text{ Pa m}^3}$   
 $= 0.166 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$

from (1):  $T_s = T + \frac{k_c}{h} C_A (-\Delta H_R)$   
 $= (450 + 273) + (1.2 \cdot 10^3) (0.166) (5.7 \cdot 10^5)$   
 $= \underline{836.5 \text{ K}} \quad (563.5^\circ\text{C}) \quad \leftarrow$