

## Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3 (KKR 100)

Lördagen den 22 december 2007 kl 8:30-13:30 i M

**Examinator:** Derek Creaser

Derek Creaser (0703-239289) kommer att besöka tentamenslokalen ca. 9:30 och 11:00.  
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 7 januari 2008.

### 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!**

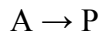
### Betygskala:

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



Uppgift 1 (6 poäng)

Första ordningens irreversibla och exoterma reaktion



utförs i en adiabatisk satsreaktor. Reaktorn innehåller  $0.5 \text{ m}^3$  vätskelösning vid  $320 \text{ K}$ . Reaktionen startas genom att tillföra  $5 \text{ kmol}$  A till lösningen. När reaktionen har startat pumpas ytterligare lösning med temperaturen  $300 \text{ K}$  till reaktorn för att kontrollera temperaturen. Tillflödes hastigheten av lösningen styrs så att temperaturen i reaktorn ökar med en konstant hastighet på  $50 \text{ K h}^{-1}$ .

- Vad är omsättningen av A 1 timme efter att A satsades i reaktorn?
- Vad är den totala vätskevolymen i reaktorn efter 1 timmes drift?

DATA:

Lösningens densitet  $1000 \text{ kg m}^{-3}$

Lösningens värmekapacitet  $3 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$

Reaktionsentalpi ( $\Delta H_R$ )  $-60 \text{ kJ mol}^{-1}$

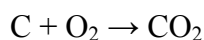
Hastighetskonstant  $k = 3 \cdot 10^8 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \text{ s}^{-1}$

Aktiveringsenergi ( $E$ )  $80 \text{ kJ mol}^{-1}$

Lösningens densitet och värmekapacitet kan anses vara oberoende av temperatur och sammansättning.

Uppgift 2 (5 poäng)

Små kolpartiklar förbränns i en fluidiserad bädd. Beräkna temperaturen på en kolpartikel som befinner sig i en gas vid  $800^\circ\text{C}$ . Reaktionshastigheten är helt bestämd av masstransporten av syre. Syret transporteras från gasbulken till partikel och diffunderar genom ett tunt poröst askskikt för att ögonblickligen reagera med kolet i gränsytan kol-aska. Värmeledningen i det fasta materialet är så hög att man kan anses temperaturen lika genom hela kolpartikel och askskikt.



DATA:

Partikeldiameter (inkluderande askskikt)  $d = 0.2 \text{ mm}$

Askskiktets tjocklek  $\delta = 0.01 \text{ mm}$

Totaltryck  $P = 1 \text{ bar}$

Gasens temperatur  $800^\circ\text{C}$

Gasens värmeledningsförmåga  $\lambda = 0.07 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$

Gasens värmekapacitet  $C_P = 34 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

Syrehalt  $y_{O_2} = 0.1$

Reaktionsentalpi  $\Delta H_R = -394 \text{ kJ mol}^{-1}$

Sherwood och Nusselttal  $Sh = Nu = 2$

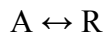
Syrets diffusivitet i gasen  $D_{O_2} = 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Syrets diffusivitet i askskikt  $D_{eff} = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Ledning: Koncentrationsgradient i askskiktet är linjärt.

Uppgift 3 (6 poäng)

För den reversibla reaktionen

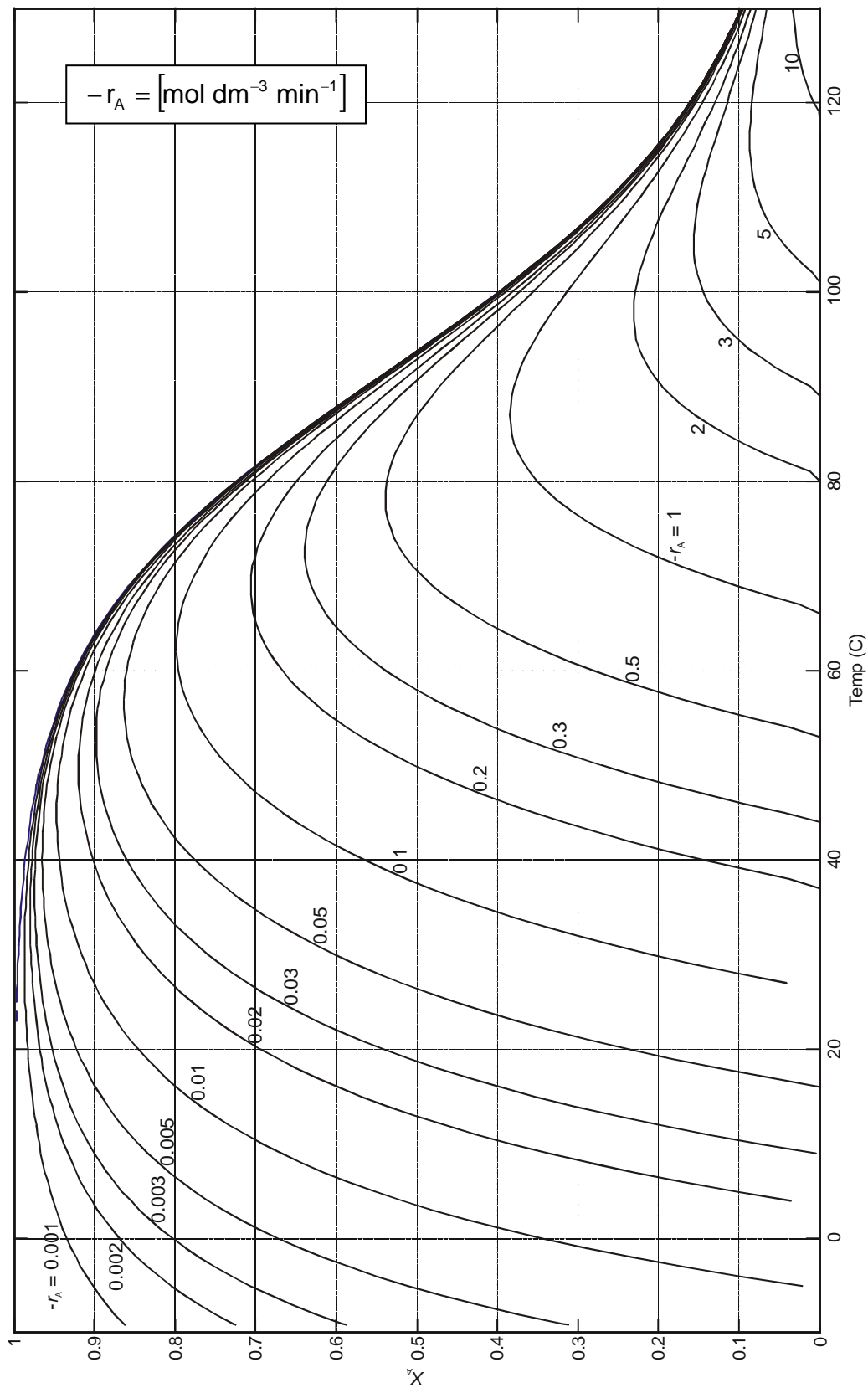


är reaktionsentalpin ( $\Delta H_R$ )  $-75.3 \text{ kJ mol}^{-1}$  och den kan antas vara oberoende av temperaturen. Reaktionsblandningens densitet och värmekapacitivitet är  $800 \text{ kg m}^{-3}$  resp.  $1.25 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  och kan betraktas som oberoende av temperatur och sammansättning.

Reaktionen skall utföras i en tubreaktor med återflöde. Färskinflödestemperaturen är  $20^\circ\text{C}$ , koncentrationen av A är  $1 \text{ kmol m}^{-3}$  och inflödes hastigheten  $1 \text{ m}^3 \text{ min}^{-1}$ . Inflödestemperaturen till reaktorn är  $35^\circ\text{C}$ . Produkten uppnår en omsättning av A som är 95% av jämviktsomsättningen. Ett  $x$ - $T$ - $r$  diagram för de givna förhållandena finns nedan.

- Beräkna erforderlig reaktorvolym.
- Om en tubreaktor utan återflöde användas, skulle erforderlig reaktor volym för att uppnå samma omsättningsgrad vara större eller mindre? Motivera ditt svar. (volymen behöver inte beräknas)
- Vilken enkel förändring skulle man kunna göra av reaktorns drift för att minska reaktorvolymen men ändå uppnå samma omsättningsgrad?

(forts...)



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 4 (6 poäng)

Ett spårämnesförsök genomförs med vatten som flödar genom en tubreaktor som har en innerdiameter på 2.85 cm. En lösning innehållande  $\text{KMnO}_4$  och volymen  $16.2 \text{ cm}^3$  injiceras snabbt i vattenströmmen som flödar genom tuben. En fotoelektrisk cell placerad 2.75 m nedströms från injektionspunkten används för att övervaka utflödeskoncentrationen ( $C_{\text{KMnO}_4}$ ) från tuben. Experimentell data för uppehållstidsfördelningen visas nedan.

t (s)	$C_{\text{KMnO}_4}$ (a.u.)
0	0
4	53
8	58
12	39
16	22
20	11
24	7
28	4
32	2.5
36	1
40	0

- Bestäm det antal tankar i en ”tankar i serie” modell som representerar tuben.
  - Bestäm dispersionskoefficienten i en dispersionsmodell om man antar att ingen dispersion skedde i inloppet och utloppet till tuben?
- 

Uppgift 5 (3 poäng)

I en industriell process vill man använda två reaktorer i serie, först en omrörd tankreaktor med volymen  $2 \text{ m}^3$  och sedan en tub-reaktor med volym  $5 \text{ m}^3$ . Volymflödet genom reaktorerna är  $0.3 \text{ m}^3/\text{min}$ . Eftersom man misstänker att reaktorerna inte är helt ideala utförde man experiment för att mäta uppehållstidsfördelningen (Residence Time Distribution, RTD) i systemet. Dessa data skall sedan användas i en segregationsmodell för att prediktera reaktorprestanda vid andra betingelser.

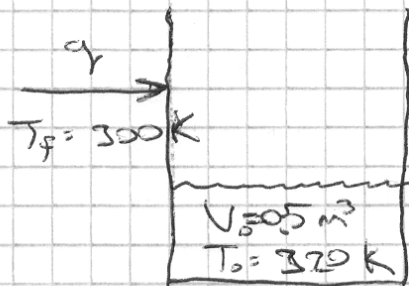
- Om reaktorsystemet hade varit idealt, hur skulle uppehållstidsfördelningen ( $E(t)$ ) se ut? Bifoga en skiss.
- Om reaktorerna skulle vara placerade i omvänd ordning (dvs tub-reaktorn först), hur skulle deras ideala uppehållstidfördelning se ut? Bifoga en skiss.
- Om reaktionsordningen skulle vara av 2:a ordningen, hur tillförlitlig skulle denna modell vara? Vad skulle vara en bättre modell för reaktorsystemet om man skall använda de uppmätta uppehållstidfördelningsdata?

Uppgift 6 (4 poäng)

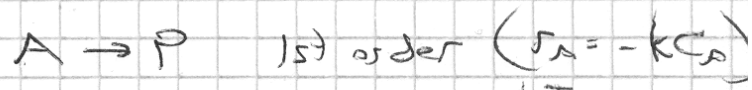
En exoterm gasfas-reaktion skall utföras i en reaktor med en packad bädd av fasta, porösa katalysatorpartiklar.

- i. Förklara hur masstransportbegränsningar kan påverka prestanda hos reaktorn.
- ii. Var någonstans i reaktorn är det mest troligt att masstransportbegränsningar blir viktigt?
- iii. Förklara hur värmetransportbegränsningar kan påverka prestanda hos reaktorn.
- iv. Var någonstans i reaktorn är de mest troligt att värmetransportbegränsningar blir viktigt?

# Uppgift 1



$X_A = ?$   
 $t = 1 \text{ h}$



$\Delta H_R = -60 \text{ (kJ/mol)}$

$k = 3 \cdot 10^8 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \text{ s}^{-1}$

$E = 80 \text{ (kJ/mol)}$

$q$  is controlled so that  $T = T_0 + at$   
where  $a = 50 \text{ K/h}$

mole balance for A:

$$\frac{dN_A}{dt} = -kC_A V$$

$$\frac{dN_A}{dt} = -A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) N_A$$

$$-A \int_0^t \exp\left(-\frac{E}{R(T_0 + at)}\right) dt = \int_{N_{A_0}}^{N_A} \frac{dN_A}{N_A}$$

$$\frac{N_A}{N_{A_0}} = \exp\left[-A \int_0^t \exp\left(-\frac{E}{R(T_0 + at)}\right) dt\right] \quad (1)$$

Integral solved numerically for  $t = 1 \text{ h}$

$$\frac{N_A}{N_{A_0}} = 0.239$$

$$X_A = 1 - \frac{N_A}{N_{A_0}} = \underline{0.761} \quad \leftarrow (1)$$

Adiabatic Heat Balance:

$V_f$  is total amount of solvent added to control temp.

$$V_f \rho C_p (T - T_f) + V_0 \rho C_p (T - T_0) + (N_{A_0} - N_A) \Delta H_R = 0$$

$$V_f = \frac{V_0 \rho C_p (T_0 - T) - N_{A_0} X_A \Delta H_R}{\rho C_p (T - T_f)}$$

Uppgift 1

2/2

$$V_f = 0.73 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{tot}} = V_0 + V_f = \underline{1.73 \text{ m}^3} \quad \leftarrow \text{b)}$$

A more complicated approach...

Alternative is Adiabatic heat balance in integral form:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{q(t) \rho C_p (T_f - T) + (N_{A0} - N_A) (-\Delta H_R)}{V \rho C_p} = a$$

$$q(t) = \frac{a V \rho C_p + (N_{A0} - N_A) (-\Delta H_R)}{\rho C_p (T_f - T)} \quad \text{c)}$$

$$\text{from c)} \quad N_A = N_{A0} \exp\left[-A \int_0^t \exp\left(-\frac{E}{R(T_0 + at)}\right) dt\right] \quad \text{d)}$$

$$T = T_0 + at \quad \text{e)}$$

$$V_{\text{tot}} = V = V_0 + \int_0^t q dt \quad \text{f)}$$

sub d), e) and f) in c)

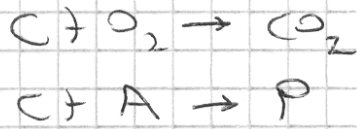
solve for  $q(t)$

Then ~~integrate~~ integrate  $q(t)$  in f) to get  $V_{\text{tot}}$ .



# Üppgift 2

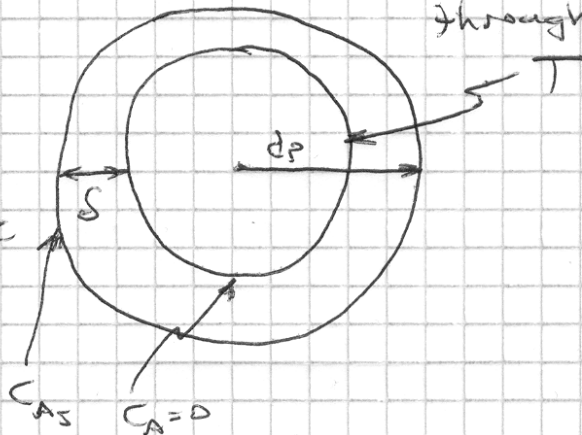
1/2



$$d_p = 0.2 \text{ mm}$$
$$\delta = 0.01 \text{ mm}$$

$$Sh = Nu = 2$$

$$y_{A,b} = 0.1$$
$$T_b = 800^\circ\text{C}$$



Temp.  $T$  is const. throughout solid

since reaction much faster than transport.

Since there is no reaction in ash coating, flux of A ( $N_A$ ) is constant and conc. gradient is linear. Then flux of A in ash layer is:

$$N_A = \frac{D_{eff}}{\delta} (C_{A,s} - 0)$$

At steady state flux of A from gas bulk equals flux of A in ash layer:

$$N_A = k_c (C_{A,b} - C_{A,s}) = \frac{D_{eff}}{\delta} C_{A,s} \quad (1)$$

Heat flux from bulk equals heat generated by reaction:

$$\dot{Q} = h (T_b - T) = k_c (C_{A,b} - C_{A,s}) (\Delta H_R) \quad (2)$$

$$k_c = \frac{2D}{d_p} = \frac{2 \left( \frac{10^3 \text{ mm}}{1000} \right) \left( \frac{10^{-5} \text{ m}^2}{\text{s}} \right)}{0.2 \text{ mm}} = 0.1 \text{ m/s}$$

$$h = \frac{2\lambda}{d_p} = \frac{2 \left( \frac{10^3 \text{ mm}}{1000} \right) \left( \frac{0.07 \text{ W}}{\text{m} \cdot \text{K}} \right)}{0.2 \text{ mm}} = 700 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}}$$

$$C_{A,b} = y_{A,b} \frac{P}{RT} = \frac{0.1 \left( 10^5 \text{ Pa} \right)}{(800 + 273) \text{ K} \left( 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \right)}$$

$$C_{A,b} = 1.12 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

uppgift 2 (cont.)

2/2

from (1)

$$c_{A_s} = \frac{k_c c_{A_b}}{k_c + \frac{D_{eff}}{\delta}}$$

$$\frac{D_{eff}}{\delta} = \frac{10^{-6} \frac{m^2}{s}}{5} \Bigg| \frac{10^3 \text{ max}}{m} = 0.1 \frac{m}{s}$$

$$c_{A_s} = 0.5 \quad c_{A_b} = 0.56 \frac{\text{mol}}{m^3}$$

from (2)

$$T = \frac{h T_b - k_c (c_{A_b} - c_{A_s}) (\Delta H)_R}{h}$$

$$k_c (c_{A_b} - c_{A_s}) (\Delta H)_R = \frac{0.1 \text{ m}}{s} \left( 0.5 \left( 1.12 \frac{\text{mol}}{m^3} \right) \right) \frac{394 \cdot 10^3 \text{ J}}{\text{mol}}$$

$$= -2.21 \cdot 10^4 \frac{\text{W}}{m^2 \cdot s}$$

$$T = T_b + \frac{2.21 \cdot 10^4}{700}$$

$$T = T_b + 31.5$$

$$= \underline{831.5^\circ\text{C}} \quad \leftarrow$$

Note that in solution above influence of Temp. on conc. of A at surface is neglected. More rigorously:

$$c_{A_s} = \gamma_{A_s} \frac{P}{RT}$$

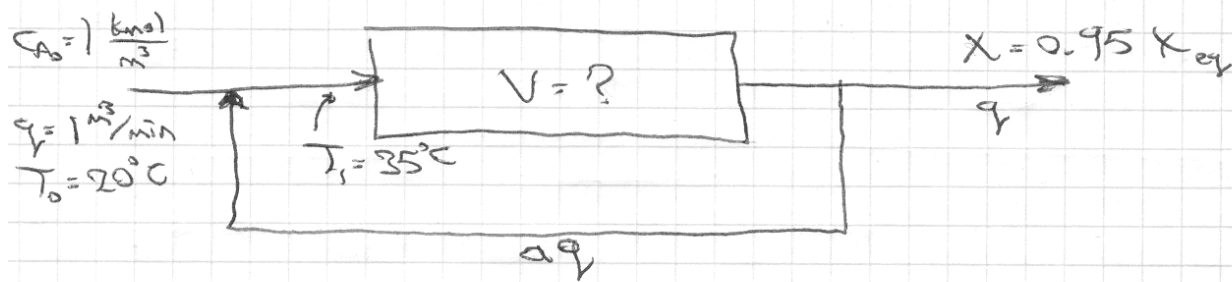
$$\text{then, } c_{A_s} = 0.54 \frac{\text{mol}}{m^3}$$

Using this result in (2) and iterating, the solid temp. converges to:

$$T = \underline{830.6^\circ\text{C}} \quad \leftarrow$$

# Uppgift 3

1/3



$$A \approx R \quad \Delta H_R = -75.3 \text{ kJ/mol}$$

$$\rho = 800 \text{ kg/m}^3 \quad c_p = 1.25 \text{ kJ/kg}\cdot\text{K}$$

Heat balance for adiabatic reactor:

$$q_v \rho c_p (T_0 - T_{ref}) - q_v \rho c_p (T - T_{ref}) + X q_v c_{A0} (-\Delta H_R) = 0$$

$$q_v \rho c_p (T_0 - T) + X q_v c_{A0} (-\Delta H_R) = 0 \quad (T_{ref} = T)$$

$$T = \frac{X c_{A0} (-\Delta H_R)}{\rho c_p} + T_0$$

$$T = 75.3 X + 20 \quad (\text{operating line})$$

from plot  $X_{eq} = 0.76$

$$\left. \begin{aligned} X_F &= 0.95(0.76) = 0.72 \\ T_F &= 74.2^\circ\text{C} \end{aligned} \right\} \text{outlet conditions.}$$

$$\left. \begin{aligned} \text{at } T_i &= 35^\circ\text{C} \\ (\text{from eq.}) X_i &= 0.20 \end{aligned} \right\} \text{reactor inlet conditions.}$$

mole balance at mix point:

$$q_v c_{A0} + a q_v c_{A0} (1 - X_F) = q_v (1+a) c_{A0} (1 - X_i)$$

$$a (X_i - X_F) = -X_i$$

$$a = \frac{X_i}{X_i - X_F} = 0.38$$

$$q_n = q_v (1+a) = 1.38 \text{ m}^3/\text{min.}$$

Uppgift 3 (cont.)

PFR

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A$$

2/3

$$q_1 c_{A1} \frac{dX_A}{dV} = -r_A$$

$$V = q_1 c_{A0} (1 - X_1)$$

$$\int_{X_1}^{X_F} \frac{dX_A}{-r_A}$$

$X$	$-r_A \left( \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3 \cdot \text{min}} \right)$	$\frac{1}{-r_A}$
0.2	0.146	6.85
0.31	0.2	5
0.4	0.25	4
0.52	0.3	3.33
0.62	0.3	3.33
0.7	0.2	5
0.72	0.13	7.69

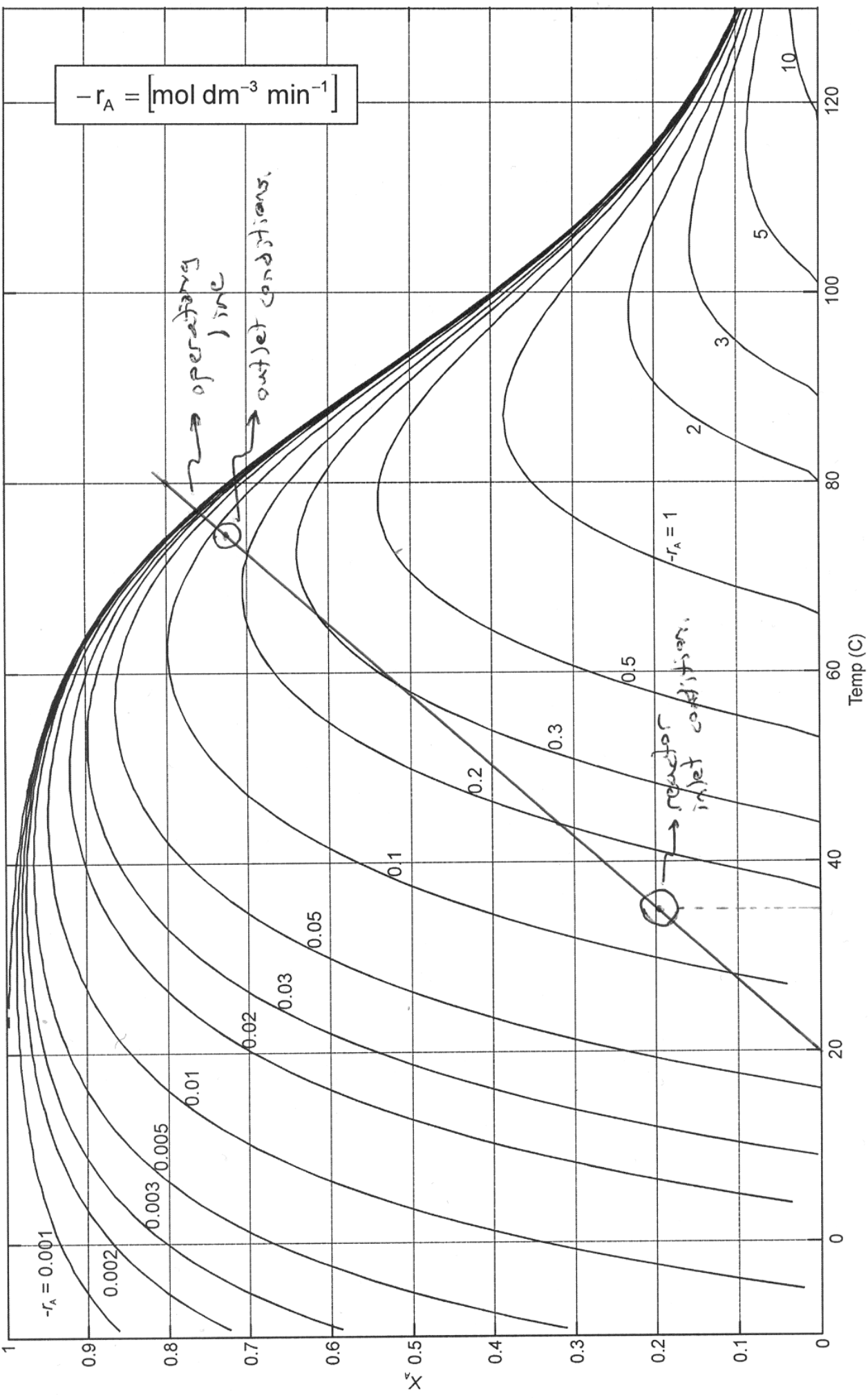
trapezoidal integration

$$\int_{X_1}^{X_F} \frac{1}{r_A} dX_A = 2.29 \frac{\text{min dm}^3}{\text{mol}}$$

$$V = \frac{1.38 \text{ mol}}{\text{min}} \cdot \frac{1 \text{ kmol}}{\text{mol}} (1 - 0.2)$$

$$\frac{2.29 \text{ min dm}^3}{\text{mol}} \cdot \frac{10^3 \text{ mol}}{\text{kmol}} \cdot \frac{\text{m}^3}{10^3 \text{ dm}^3}$$

$$V = \underline{\underline{2.53 \text{ m}^3}} \quad \leftarrow (a)$$





Oppg 4

16.2 ml  
of  $KMnO_4$   
injected.  
quickly



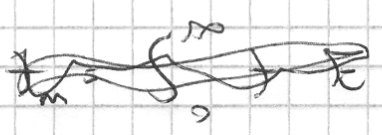
$d = 2.85 \text{ cm}$

$L = 2.75 \text{ m}$

→ assume  
pulse  
injection.

$t$ (s)	$c(t)$	$E(t)$	$t E(t)$	$(t - t_m)^2 E(t)$
0	0	0	0	0
4	53	0.0671	0.2684	3.0059
8	58	0.0734	0.5873	0.5327
12	39	0.0494	0.5924	0.0842
16	22	0.0279	0.4456	0.7841
20	11	0.0139	0.2785	0.2059
24	7	0.0089	0.2127	1.5489
28	4	0.0051	0.1418	1.5165
32	2.5	0.0032	0.1013	1.4366
36	1	0.0013	0.0456	0.8106
40	0	0	0	0

All integration done with trapezoidal rule.



$$\int_0^{\infty} c(t) dt \approx 790$$

pulse  
injection

$$E(t) = \frac{c(t)}{\int_0^{\infty} c(t) dt} \quad (\text{see above})$$

$$t_m = \int_0^{\infty} t E(t) dt \approx 10.7 \text{ s}$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt \approx 43.78 \text{ s}^2$$

Discharge A

2/2

$$A = \frac{f_m^2}{g^2} = 2.6 \text{ tanks} \quad \leftarrow \text{ (b)}$$

no dispersion at inlet and outlet

→ closed conditions

$$\frac{b^2}{f_m^2} = \frac{2}{\rho_e} - \frac{2}{\rho_i} \quad \left( 1 - 24\rho_e \rho_i \right) = 0.382$$

solving  $\rho_e = 34129$

$$U = \frac{L}{f_m} = \frac{2.75 \text{ m}}{10.7 \text{ s}} = 0.257 \text{ m/s}$$

$$D_a = \frac{UL}{\rho_e} = 0.18 \text{ m}^2/\text{s} \quad \leftarrow \text{ (b)}$$