

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

Lördagen den 20 december 2008 kl 8:30-13:30 i V

Examinator: Docent Louise Olsson

Louise Olsson (0709-728533) kommer att besöka tentamenslokalen på förmiddagen.
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 9 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

Betygskala:

Poäng	Betyg
15-19.5	3
20-24.5	4
25-30	5



Uppgift 1 (5 poäng)

En katalytisk vätskefasreaktion utförs i en satsreaktor. Reaktionen är $A \rightarrow B$ och är av första ordningen. Vid uppstart av processen börjar man först med en liten volym (V_{r0}) för att lösa katalysatorn och sedan fyller man på med mer vätska tills volymen V_r är nådd. Inflödet till reaktorn består av ren A.

Vad blir omsättningsgraden av A precis när reaktorn blivit full (uppnått V_r)?

Volymflöde av A vid påfyllning	$q_f = 0.1 \text{ m}^3/\text{s}$
Koncentration av reaktant i inflödet till reaktorn	$c_{Af} = 0.5 \text{ kmol/m}^3$
Reaktionsvolym då katalysator satsas	$V_{r0} = 0.5 \text{ m}^3$
Reaktionsvolym vid full reaktor	$V_r = 5.0 \text{ m}^3$
Katalysatormängd satsad	$W = 0.5 \text{ kg}$
Hastighetskonstant	$k = 0.1 \text{ m}^3/(\text{s kg kat.})$

Uppgift 2 (4 poäng)

- a) För att undersöka idealiteten hos en tubreaktor utförs ett spårämnesförsök, som redovisas i tabellen nedan. Reaktionen ($A \rightarrow B$) är av första ordningen map A. Tubdiameteren är 10 cm och längden 6.36m. Häsighetskonstanten k är 0.25 min^{-1} .

t (min)	c (mg/l)
0	0
1	1
2	5
3	8
4	10
5	8
6	6
7	4
8	3
9	2.2
10	1.5
12	0.6
14	0

Använd tankseriemodellen för att beräkna omsättningsgraden av A. För att underlätta beräkningar är följande integraler givna (enheter enl. tabell):

$$\int_0^{\infty} c_s(t) dt = 50.65; \quad \int_0^{\infty} t c_s(t) dt = 259.7; \quad \int_0^{\infty} t^2 c_s(t) dt = 1633$$

- b) Detta företag har flertalet reaktorer. Efter ett spårämnesförsök i en annan reaktor erhöles följande resultat.

t (min)	Pulssvar (mg/l)
0.1	0.2
0.2	0.17
1.0	0.15
2.0	0.125
5.0	0.07
10	0.02
30	0.001

Vilken typ av flödesreaktor liknar detta mest? Motivera!

Uppgift 3 (7 poäng)

- a) Rita upp en jämviktskurva som funktion av temperatur för en exoterm process (X-T diagram. Rita också in "locus of maximum rates" (där $\left(\frac{\partial r}{\partial T}\right)_x = 0$).
- b) Beskriv hur man bestämmer inloppstemperaturen till reaktorn för att uppnå en viss omsättningsgrad och samtidigt minimera reaktorvolym. Beskriv detta både för tank och tubreaktor.
- c) Beskriv hur man optimerar processen om man har 3 tankar med mellanliggande kylning.
- d) Förklara konceptet cold-shot.

Uppgift 4 (7 poäng)

Anna har precis börjat som civilingenjör på ett företag och får i uppgift att designa reaktorsystemet för gasfas reaktionen $A \rightarrow R + 2S$. Den sker isobart och isotermt vid 0.3MPa och 650°C. Hon kan välja mellan en tank, en tub eller en kombination av de två. Slutomsättningsgraden skall vara 0.75. Reaktionen är första ordningen map A och hastighetskonstanten är $k=0.01s^{-1}$. Vidare innehåller inflödet 50 mol% A och resten inert.

- a) Vilket reaktorsystem skall använda för att minimera den totala reaktorvolymen?
- b) Beräkna minsta möjliga totalvolym för att produktionen av S skall bli 1 mol S/s.
- c) Om istället reaktionen var av andra ordningen, vilken konfiguration skall Anna då välja?

Uppgift 5 (7 poäng)

En katalytisk vätskefasreaktion sker i en tub. Katalysatorpartiklarna är sfäriska. Reaktionen är $A \rightarrow B$ och är första ordningen med avseende på A. Filmmotståndet tros vara viktigt i processen, men motståndet inuti katalysatorpartiklarna är så litet att det kan försummas.

- Beräkna omsättningsgraden av A efter reaktorn.
- Beräkna omsättningen om filmmotståndet försummas. Är filmmotståndet viktigt?

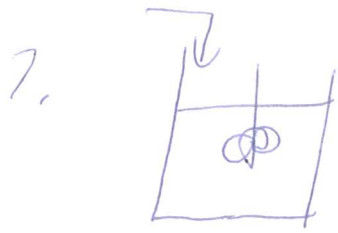
Massflödeshastighet i tom tub, G	$0.1 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$
Yttre katalysator area per bädd volym, a	$1000 \text{ m}^2/\text{m}^3$
Viskositet μ	$10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Diffusivitet av A i vätskan, D_A	$5.0 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Tubens diameter, d_t	0.1 m
Tubens längd, L	1.2 m
Hastighetskonstant, k	$3 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$
Partikeldiameter, d_p	$8 \cdot 10^{-6}$
Densiteten, ρ	$700 \text{ kg}/\text{m}^3$
Koncentration av reaktant i inflödet till reaktorn	$c_{Af} = 0.5 \text{ kmol}/\text{m}^3$

Yoshidas korrelation:

$$j_D = 0.84 Re^{-0.51} \quad 0.01 < Re < 50$$

$$j_D = 0.57 Re^{-0.41} \quad 50 < Re < 1000$$

där $Re = \frac{G}{a\phi\mu}$



$$MB: q \cdot C_{Af} - k C_A W = \frac{dN_A}{dt} \quad (7)$$

$$N_A = C_A \cdot V$$

$$\frac{dN_A}{dt} = C_A \frac{dV}{dt} + V \frac{dC_A}{dt} \quad (2)$$

$$Pq = \frac{\partial (PV)}{\partial t}$$

$$q = \frac{dV}{dt}$$

$$V = V_0 + q \cdot t \quad (3)$$

$$(2) \quad \frac{dN_A}{dt} = C_A \cdot q + (V_0 + q \cdot t) \frac{dC_A}{dt} = q \cdot C_{Af} - k C_A \cdot W \quad (1)$$

$$(V_0 + q \cdot t) \frac{dC_A}{dt} = q \cdot C_{Af} - (kW + q) C_A$$

$$\left[\ln(V_0 + q \cdot t) \cdot \frac{1}{q} \right]_0^t = \left[\ln(q \cdot C_{Af} - (kW + q) C_A) \cdot \frac{1}{-(kW + q)} \right]_0^t$$

$$- \frac{1}{q} (kW + q) \cdot (\ln(V_0 + q \cdot t) - \ln V_0) =$$

$$= \ln \frac{q C_{Af} - (kW + q) C_A}{q C_{Af} - (kW + q) C_{Af}}$$

$$t = \frac{V - V_0}{q}$$

$$\Rightarrow C_A = 0,35$$

$$C_A = C_{Af} (1 - x) \Rightarrow x = 1 - \frac{C_A}{C_{Af}} = \underline{\underline{29\%}}$$

(2)

(2) a) Tankserie

$$N = \frac{\tau^2}{\sigma^2}$$

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} = \frac{C(t)}{50,65} \leftarrow \text{givet supply}$$

$$t_m = \int_0^{\infty} t E(t) dt = \int_0^{\infty} t \cdot \frac{C(t)}{50,65} dt =$$

$$= \frac{259,7}{50,65} = \underline{\underline{5,12}}$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 E(t) dt = \int_0^{\infty} t^2 E(t) dt -$$

$$2 \int_0^{\infty} t \tau E(t) dt + \int_0^{\infty} \tau^2 E(t) dt =$$

$$= \int_0^{\infty} t^2 \frac{C(t)}{50,65} dt - 2\tau \int_0^{\infty} t E(t) dt + \tau^2 \int_0^{\infty} \frac{C(t)}{50,65} dt =$$

$$= \frac{1633}{50,65} - \frac{2\tau}{50,65} 259,7 + \tau^2 = \underline{\underline{5,95}}$$

$$N = \frac{\tau^2}{\sigma^2} = \underline{\underline{4}}$$

MBF ^{-tank 7}

$$q \cdot C_{Af} - q \cdot C_{Af} (1 - x_7) - k C_{Af} (1 - x_7) \cdot V_7 = 0$$

$$\tau_7 = \frac{V_7}{q} \quad \tau_7 = \frac{\tau}{N}$$

$$1 - (1 - x_7) - k (1 - x_7) \cdot \tau_7 = 0$$

(3)

$$x_7 = \frac{k \tau_7}{1 + k \tau_7}$$

$$\text{där } \tau_7 = \frac{\tau}{N}$$

$$x_1 = 0,24, \quad x_2 = 0,43, \quad x_3 = 0,57, \quad x_4 = \underline{\underline{\underline{0,67}}}$$

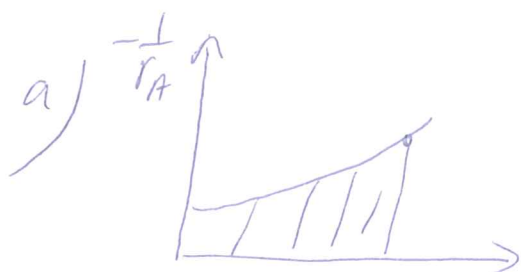
Det går också att sätta upp en generell-
balans som kan användas, speciellt användbar
om många tankar erhålls.

b)



Tanke

4.



Tub birst!

$$r_A = -k C_A$$

$$-\frac{1}{r_A} = \frac{1}{k C_A} = \frac{1}{k C_{A0}(1-X)}$$

b) $F_S = 1 \text{ mol/s}$

$$F_S - (F_S + dF_S) + 2kC_A dV = 0$$

$$dF_S = 2kC_A dV$$

$$F_S = 2X_A \cdot F_{A,m}$$

$$F_{A,m} = \frac{F_S}{2X_A} = \frac{1}{2 \cdot 0,75} = \underline{\underline{0,67 \text{ mol/s}}}$$

$$F_{\text{tot},m} = 2 \cdot 0,67 \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{mert},m} = 0,67 \text{ mol/s}$$

$$F_{S,in} = 0$$

$$F_{R,m} = 0$$

In	1 reaktor
A $F_{A,m} = 0,67$	$F_A = F_{A,m}(1-X_A)$
R $F_{R,in} = 0$	$F_R = F_{A,m} X_A$
S $F_{S,in} = 0$	$F_S = F_{A,m} \cdot X_A$
I $F_{I,m} = 0,67$	F_{mert}
$F_{\text{tot},m} = 1,34$	$F_{\text{tot}} = 1,34 + 1,34 X_A$

(5)

$$y_A = \frac{F_A}{F_{tot}} = \frac{0,67(1-x_A)}{1,34 + 1,34x_A}$$

$$C_A = y_A \cdot C_{tot} \quad C_{tot} = \frac{P}{RT}$$

$$\begin{cases} dF_S = 2k C_A dV \end{cases}$$

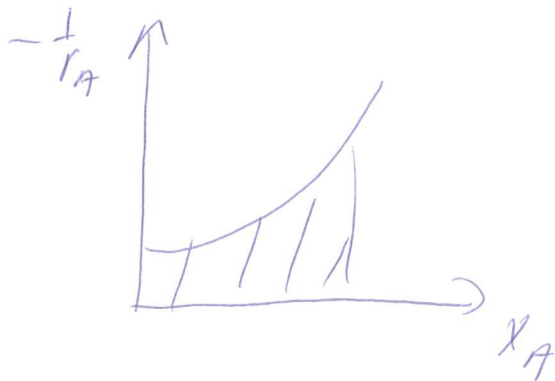
$$\begin{cases} dF_S = 2 F_{Am} dx_A \end{cases}$$

$$2 F_{Am} dx_A = 2k y_A C_{tot} dV = 2k \cdot \frac{0,67(1-x_A)}{1,34 + 1,34x_A} \cdot C_{tot} \cdot dV$$

Integrera lös ut V .

$$\Rightarrow \underline{\underline{V = 6,68 \text{ m}^3}}$$

c) Tub fortfarande bäst



(5)

(6)

$$a) \quad q = v \cdot \frac{4\pi d^2}{4} = 1,12 \cdot 10^{-6}$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_A} = 286$$

$$Re = \frac{G}{a \cdot 0,91 \cdot \mu} = 0,1$$

$$j_0 = 0,84 Re^{-0,51} = 2,59$$

$$Sh = j_0 Re Sc^{1/3}$$

$$\uparrow Re = \frac{d_p G}{\mu} \quad \downarrow \text{end. F.S.} = 8,0 \cdot 10^{-4}$$

$$Sh = 0,014$$

$$Sh = \frac{k_c d_p}{D_A}$$

$$k_c = \frac{D_A Sh}{d_p} = 8,3 \cdot 10^{-6}$$



$$M_B \quad F_A - (F_A + dF_A) - k_c \cdot a (C_{A6} - C_{A5}) dV = 0$$

$$-dF_A = k_c a (C_{A6} - C_{A5}) dV$$

$$F_A = q C_{A6} \quad dF_A = q dC_{A6}$$

$$-dF_A = q \cdot dC_{A6} = k_c \cdot a (C_{A6} - C_{A5}) \cdot dV$$

$$\frac{m}{s} \cdot \frac{m^2}{m^3} \cdot \frac{mol}{m^3} \cdot m^3 = mol/s \quad OK$$

Balans: $k_c \cdot a (C_{A6} - C_{A5}) = k \cdot C_{A5}$

⑦

$$\frac{m}{s} \cdot \frac{m^2}{m^3} \cdot \frac{mol}{m^3} = \frac{mol}{s \cdot m^3} \quad \leftarrow \frac{1}{s} \cdot \frac{mol}{m^3} \quad \underline{\underline{OK}}$$

$$k_c a C_{A6} - k_c a C_{A5} = k \cdot C_{A5}$$

$$C_{A5} = \frac{k_c \cdot a}{k + k_c a} \cdot C_{A6}$$

in MB:

$$-q dC_{A5} = k_c a \left(C_{A6} - \frac{k_c a}{k + k_c a} C_{A6} \right) dV$$

Integrera $\Rightarrow C_{A6} \approx 0$

$$X = 1 - \frac{C_{A5}}{C_{Af}} = \underline{\underline{1,0}}$$

b) Filmmotstånd försummas

$$F_A - (F_A + dF_A) - k C_A dV = 0$$

$$dF_A = -k C_A \cdot dV$$

$$q dC_A = -k C_A dV$$

Integrera $\int_{C_{Af}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = - \int_0^V \frac{k dV}{q}$

$$\ln \frac{C_A}{C_{Af}} = - \frac{kV}{q} \Rightarrow C_A = C_{Ae} \cdot e^{-\frac{kV}{q}} = 2,5 \cdot 10^{-9}$$

$$X = 1 - \frac{C_A}{C_{Af}} = \underline{\underline{1,0}}$$