

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

Onsdag den 19 augusti 2009 kl 8:30-13:30 i V

Examinator: Docent Louise Olsson

Louise Olsson (031-772 4390) kommer att besöka tentamenslokalen på förmiddagen.
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 8 september 2009.

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 (6 poäng)

Petra arbetar som civilingenjör och skall designa en reaktor för en andra ordningens reaktion ($r=kc^2$). Hastighetskonstanten kan beskrivas av Arrhenius ekvation med en aktiveringsenergi på 90kJ/mol. Hon kan välja mellan en tank, en tub eller en satsreaktor. Hennes uppgift är att välja reaktortyp som maximerar omsättningsgraden för en given volym.

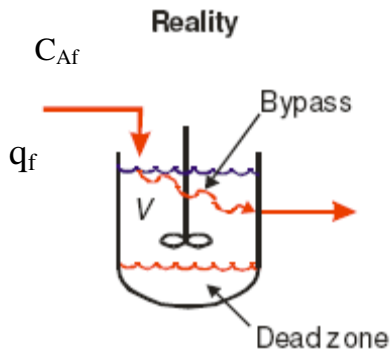
a) Vilken reaktortyp skall hon använda då reaktionen är kraftigt exoterm ($\Delta H < 0$, reaktionen bildar värme)?

b) Vilken reaktortyp skall hon använda då reaktionen är kraftigt endoterm ($\Delta H > 0$, reaktionen använder värme)?

Motivera tydligt ditt svar, gärna genom att också skissera koncentrations- och temperaturprofiler i diagram.

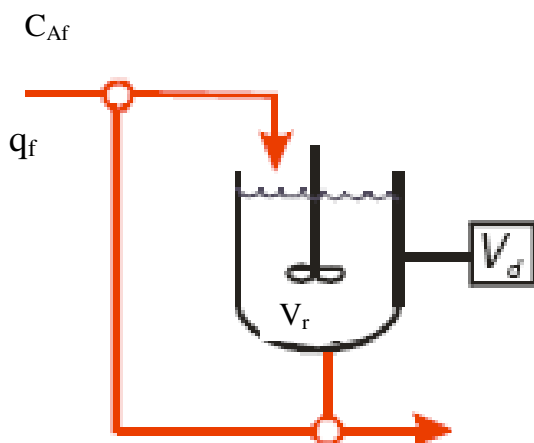
Uppgift 2 (6 poäng)

En verklig reaktor är oftast ej ideal. Reaktorn nedan har en bypass och en dödvolum. 8% av flödet går via bypass och dödvolumen utgör 15% av den totala reaktorvolymen V (Figur 1).



Figur 1.

En modell för detta system kan se ut enligt nedan:

Model

Figur 2.

Väteskefas reaktionen $2A \Rightarrow B$ sker i reaktorn. Vilken volym (V , se Figur 1) krävs för att nå en omsättningsgrad på 85% av det A som går in till *hela* anläggningen?

Koncentration av A i flödet in till hela anläggningen	$c_{Af}=500 \text{ mol/m}^3$
Totalflödet in till hela anläggningen	$q_f=2.5 \text{ m}^3/\text{s}$
Pre-exponentiell factor för reaktion 1	$A_1=1 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$
Aktiveringsenergi för reaktion 1	$E_1=90 \text{ kJ/mol}$
Temperatur i reaktorn	$T=250^\circ\text{C}$
Reaktionshastighet	$r=kc_A$
Allmänna gaskonstanten	$R=8.314$

Uppgift 3 (6 poäng)

Ett spårämnesförsök görs för att undersöka idealiteten hos en tubreaktor. Resultatet finns i tabellen nedan.

Reaktionen ($A \rightarrow B$) är av första ordningen map A. Beräkna omsättningsgraden av A med

a) Segregationsmodellen

b) Dispersionsmodellen

Jämför resultaten och kommentera dem.

Hasighetskonstanten k är 0.2 min^{-1} .

t (min)	c (mg/l)
0	0
4	3
8	8
12	13
15	11
17	5
21	2
23	0

Uppgift 4 (6 poäng)

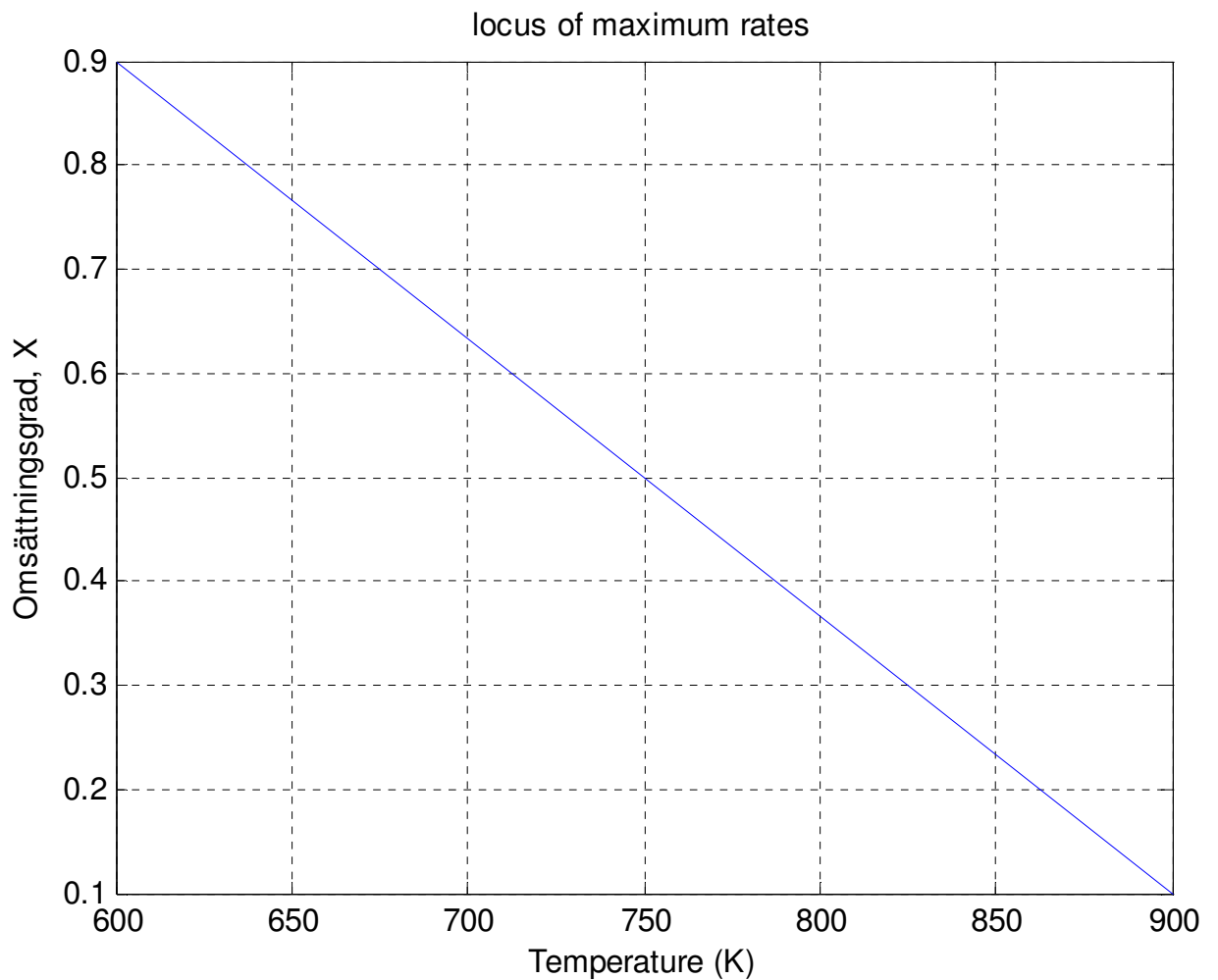
En jämviktsreaktion $A \rightarrow B$ sker med hastigheten $r=kcA$. Reaktionen sker i vätskefas. I figuren nedan är locus of maximum rates kurvan utritad. Ett koncept kallat cold-shot skall användas. Ett flöde av 3 mol/s går in till anläggningen med temperaturen 200°C . Inflödet består av 30% A och 70% inert material. Flödet delas upp i två strömmar, 60% till ström 1 och 40% till ström 2. Ström 1 förvärms till 400°C och går in i reaktor 1. Ström 2 blandas samman med ström 1 *efter* reaktor 1. Den sammanlagda strömmen går sedan in i reaktor 2. Vad blir omsättningsgraden efter reaktor 2?

Värmekapaciteten för ämne A: $63 \text{ J}/(\text{mol K})$

Värmekapaciteten för ämne B: $58 \text{ J}/(\text{mol K})$

Värmekapaciteten för ämne I: $71 \text{ J}/(\text{mol K})$

Reaktionsvärmets är $\Delta H = -70 \text{ kJ/mol}$



Uppgift 5 (6 poäng)

Ett experiment har utförts för att bestämma hastighetskonstanten, k för en första ordningens reaktion $A \rightarrow B$. Katalysatorpartiklarna är sfäriska ($5 \mu\text{m}$ i radie) och är placerade i en tubreaktor. Den yttre mass-transporten kan försummas, men EJ den inre mass-transporten i partikeln. Det är en vätskefas reaktion. Den effektiva diffusiviteten är $10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, flödet $0.03 \text{ m}^3/\text{s}$ och reaktorvolym 0.4 m^3 . Omsättningsgraden är 0.72.

Vad är k för reaktionen (enhet s^{-1})?

$$C_{Ar} = \frac{0.92}{(0.15 - 0.08) C_{Ar}} = 38.04 \text{ mol/m}^3$$

$$0.08 q_f C_{Ar} + 0.92 q_f C_{Ar} = 0.15 C_{Ar} \cdot q_f$$

$$C_{Ar} = (1-x) \cdot C_{Ar} = 0.15 C_{Ar}$$

$$0.08 q_f C_{Ar} + 0.92 q_f C_{Ar} = q_f \cdot C_{Ar}$$

Mass balance

$$\frac{V}{V} = 1$$

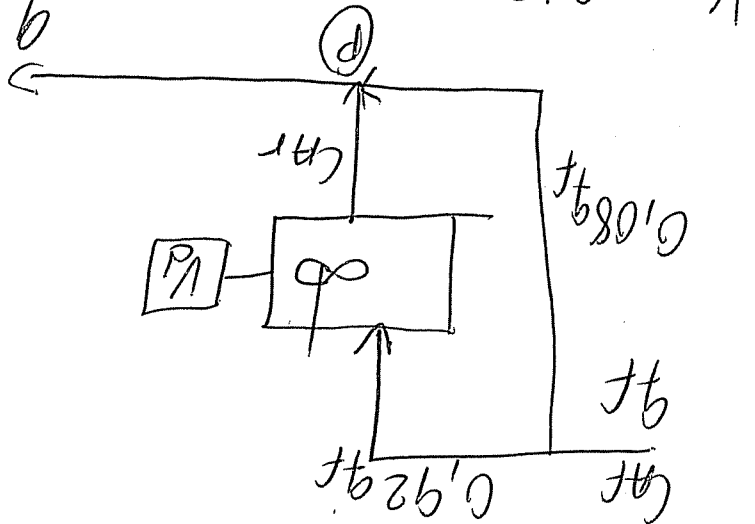
$$V_1 = 0.85 \cdot V$$

$$V = V_1 + V_2 = V_1 + 0.15V$$

$$V_2 = 0.15 \cdot V$$

C_{Ar}

q_f



Tenths 19 aug. 2029 (KRE/so)

①

$$V = \frac{0.85}{1.59} = 0.5346$$

$$V_1 = \frac{2k C_A r}{0.929 + (C_A - C_A r)} = 1.35 m^3$$

$$-2 \cdot k C_A r \cdot V_1 = 0$$

~~$$0.929 \cdot C_A r - 0.929 \cdot C_A r -$$~~

Mass balance over reactor

(2)

Sorgegattensmodell

$$\frac{dx}{dt} = k(1-x)$$

$$x = 1 - e^{-kt}$$

$$\bar{x} = \int_0^{\infty} x \cdot E(t) dt = \int_0^{\infty} (1 - e^{-kt}) E(t) dt$$

$$E(t) = \frac{\int_0^{\infty} c(t) dt}{c(t)} = \frac{138}{c(t)}$$

$$\bar{x} = 0,87$$

Dispersionmodell

$$t_m = \int_0^{\infty} t \cdot E(t) dt = 11,9$$

$$s^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt = 17,3$$

$$s^2 = \frac{t_m^2}{17,3} = \frac{11,9^2}{17,3} = 0,122$$

$$s^2 = \frac{t_m^2}{2} - \frac{pe_1}{2} - \frac{pe_2}{2} (1 - \exp(-pe_1))$$

$$\Rightarrow pe_1 = 15,32$$

$$D_a = k \tau \left(k \cdot \frac{v}{L} = k \cdot \tau \cdot t_y \cdot \tau = \frac{v}{L} \right)$$

(4)

$$D_a = 2,38$$

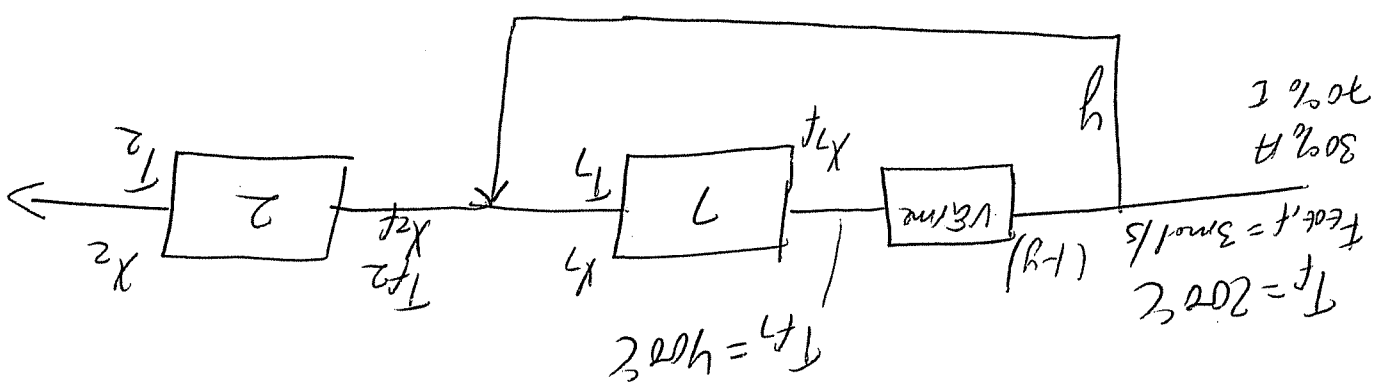
$$q = \sqrt{1 + \frac{D_a}{\rho_a}} = 1,27$$

$$1 - Y = \frac{H q \exp(\rho_a / 2)}{(1 + q)^2 \exp(\frac{2}{\rho_a} (t-1)) - (1 - q)^2 \exp(-\frac{2}{\rho_a} t)}$$

$$= 0,12$$

$$X = 0,88$$

H, Cold-shot



$y = 0,4$
 $F_{AT} = 0,3 \cdot 3$
 $F_{CF} = 0,7 \cdot 3$

VB reactor 1

$$\frac{\sum_{T_1}^{T_{CF}} (1-y) \cdot F_{CF} \int_{T_1}^{T_{CF}} c_{pC} dT - \sum_{T_1}^{T_{CF}} (1-y) F_{AT} \int_{T_1}^{T_{CF}} c_{pA} dT + (1-y) \cdot X_2 \cdot (-\Delta H) \cdot F_{AT}}{\sum_{T_1}^{T_{CF}} (1-y) F_{CF} \int_{T_1}^{T_{CF}} c_{pC} dT = (1-y) X_2 \cdot \Delta H \cdot F_{AT}}$$

$T_{CF} = T_1$

$$\sum_{T_1}^{T_{CF}} (1-y) F_{CF} \int_{T_1}^{T_{CF}} c_{pC} dT = (1-y) X_2 \cdot \Delta H \cdot F_{AT}$$

$$X_2 = \frac{F_{AT} \cdot \Delta H}{-\sum_{T_1}^{T_{CF}} F_{CF} (c_{pC} (T_1 - T_1))}$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{aligned} X_2 &= 0,388 \\ T_1 &= 292,0 \text{ K} \end{aligned} \right.$$

 Keys on r diagram

Blandingspunkt:

MB:

$$F_{A2f} \cdot y + (1-y) \cdot F_{A1f} \cdot (1-x_2) = F_{A2f}$$

$$F_{A2f} = 0,69 \text{ mol/l}$$

$$x_{2f} = 1 - \frac{F_{A1f}}{F_{A2f}} = \underline{\underline{0,23}}$$

VB:

$$\begin{aligned} \sum_{T_1}^{T_2} F_{T_1} \int_{T_1}^{T_2} c_{p,i} \Delta T + \sum_{T_1}^{T_2} F_{T_2} \cdot y \int_{T_1}^{T_2} c_{p,i} \Delta T &= \sum_{T_1}^{T_2} F_{T_2} \int_{T_1}^{T_2} c_{p,i} \Delta T \\ \text{Vgl. } T_{ref} = T_1 & \Rightarrow T_{2f} = 663,7 \text{ K} \end{aligned}$$

Vgl. } T_{ref} = T_1

$$\sum F_{T_2} \cdot y \cdot c_{p,i} (T_2 - T_1) = \sum F_{T_1} c_{p,i} (T_2 - T_1)$$

$$\Rightarrow T_{2f} = 663,7 \text{ K}$$

Reaktor 2

$\overline{V_B}$

$$\sum_{T_{ref}}^{T_2} F_{2fc} \int_{T_{ref}}^{T_2} c_{p,i} \Delta T - \sum_{T_2}^{T_{ref}} F_{2c} \int_{T_2}^{T_{ref}} c_{p,i} \Delta T +$$

$$+ F_{Af} (X_2 - X_{2f}) (-\Delta H)$$

$$SAT \quad T_{ref} = T_2$$

$$\sum F_{2fc} c_{p,i} (T_{ref} - T_2) = F_{Af} (X_2 - X_{2f}) (-\Delta H)$$

$$X_2 = X_{2f} + \frac{\sum F_{2fc} c_{p,i} (T_{ref} - T_2)}{F_{Af} (-\Delta H)}$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{X_2 = 0,54}}$$

$$k\eta = 0.0955$$

$$\boxed{k\eta = -\frac{1}{T} \cdot \ln(1 - X_{ut}) \cdot \frac{1}{t} = \eta}$$

$$\eta = \ln(1 - X_{ut}) \cdot \frac{k\eta}{t} = V$$

$$V = \frac{\ln(1 - X_{ut})}{t} \cdot \frac{k\eta}{t} = V$$

$$V = \int_{t_{aut}}^{t_{gt}} \ln(1 - X_{ut}) \cdot \frac{k\eta}{t} dt$$

$$\int_V dV = \int_{t_{aut}}^{t_{gt}} \frac{k\eta}{t} dt$$

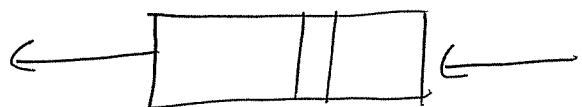
$$V = k\eta \ln\left(\frac{t_{gt}}{t_{aut}}\right)$$

$$F_A = q \cdot A \quad dF_A = q \cdot dA$$

$$-dF_A = k\eta \cdot A \cdot dV$$

$$F_A - (F_A + dF_A) - r \cdot dV = 0$$

MB:



$$r = k \cdot \eta \cdot A$$

Thiele modal

$$\phi_n = r_p \sqrt[n-1]{k \cdot (c_{AS})^{n-1}} = r_p \sqrt[n]{k}$$

Formen für Thiele modalen berechnen für k.

Om. analys:

$$m \cdot \sqrt[n]{\frac{1}{\frac{S}{m^2}}} = m \sqrt[n]{\frac{1}{m^2}} = \frac{m}{m} = 1$$

OK!

Iteration:

1. Geiss k

2. Berechnen ϕ_n

3. $\eta = \frac{\phi}{3} \left[\frac{1}{\tan \eta} - \frac{1}{\phi} \right]$

4. $k = \frac{1,0955}{\eta}$

5. Anw. auf nige k e ger 2-4 osv. HV

Stabilität k.

3,536

k	ϕ_n	η	k
0,5	0,61	0,61	0,16
0,16	2,0	0,81	0,12
0,12	1,73	0,84	0,11
0,11	1,58	0,85	0,11

Starr: $k = 0,115^{-1}$