

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

Lördagen den 19 december 2009 kl 8:30-13:30 i Hörsalar på hörsalsvägen

**Examinator:** Docent Louise Olsson

Louise Olsson (031-772 4390) kommer att besöka tentamenslokalen på förmiddagen.

### 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

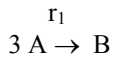
### Betygskala:

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



Uppgift 1 (6 poäng)

En katalytisk reaktion



sker i en reaktor med en hastighet,  $r_1$ , som är andra ordningen map A. Enheten på  $r$  är mol/(s m<sup>3</sup>).

- a) Reaktorn är en tubreaktor. Sätt upp en **transient** (tidsberoende) materialbalans för denna reaktor. Motivera!



- b) Reaktionen sker i en semisats reaktor. Koncentrationen i inflödet är  $c_{Af}$ . Sätt upp balanser för detta system för att beräkna koncentrationen i reaktorn efter tiden  $t$ . (tiden  $t$  är större än tiden för fyllning). Dvs efter en viss tid sker reaktionen utan inflöde. Ekvationerna behöver ej lösas, men lösningsgången skall beskrivas i detalj. Alla ekvationer skall motiveras och alla beteckningar skall förklaras.

Uppgift 2 (6 poäng)

- a) En tubreaktor som är designad för kinetikstudier kan betraktas som ideal. En första ordningens vätskefasreaktion gav 30% omsättning. Vätskan har ett flöde av 3000 ml/min. Reaktorn är 60 mm lång och 20 mm i diameter. Koncentrationen av A i inflödet var  $300 \text{ mol/m}^3$ .

Processen används sedan för samma reaktion, men i en icke ideal reaktor. Reaktorn beter sig som en tankserie, pga av axiell dispersion. Temperaturen är samma i de 2 reaktorer. Vad är omsättningsgraden av A efter reaktorn? Koncentrationen av A i inflödet var  $300 \text{ mol/m}^3$ .

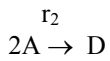
Data för icke-ideal reaktor:

Axiell dispersion	$5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Längd	30 mm
Diameter	10 mm
Flöde	500 ml/min

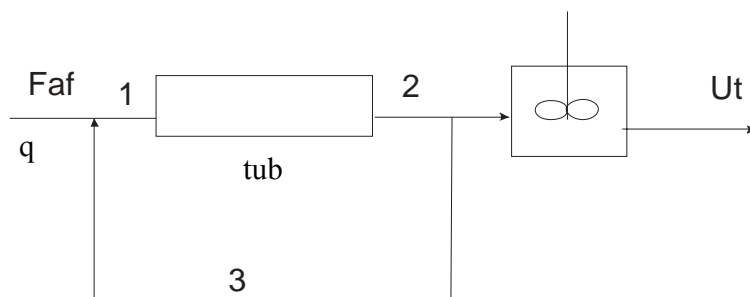
- b) Skissera hur uppehålstidsfördelningsfunktionen ser ut för
- En ideal tank+ideal tub i serie. Motivera!
  - Kanalbildning i en tub. Motivera!

Uppgift 3 (6 poäng)

I en process reagerar ämnet A och bildar både ämne B och D i en parallell reaktion



Reaktionerna sker i följande reaktorkombination och är båda av första ordningen



Vilken volym skall tanken ha för att uppnå en omsättningsgrad av 85% från hela anläggningen? Koncentrationen av A ut från tubreaktorn,  $c_{A2}$ , är  $180 \text{ mol/m}^3$ .

Data

Hastighetskonstanten, $k_1$	$0.05 \text{ s}^{-1}$
Hastighetskonstanten, $k_2$	$0.02 \text{ s}^{-1}$
Volym, tub, $V_{\text{tub}}$	$0.7 \text{ m}^3$
Molflöde A i inflödet, $F_{Af}$	$30 \text{ mol/s}$
Flöde i inflödet, $q$	$0.1 \text{ m}^3/\text{s}$
Recirkulation, $\alpha$	30% av flöde 2 återförs

Uppgift 4 (6 poäng)

Reaktionen



är en jämviktsreaktion, med hastigheten  $r_f$  för reaktionen  $A \rightarrow B$  och hastigheten  $r_b$  för reaktionen  $B \rightarrow A$ . Både framåt och bakåt reaktionerna är av första ordningen.

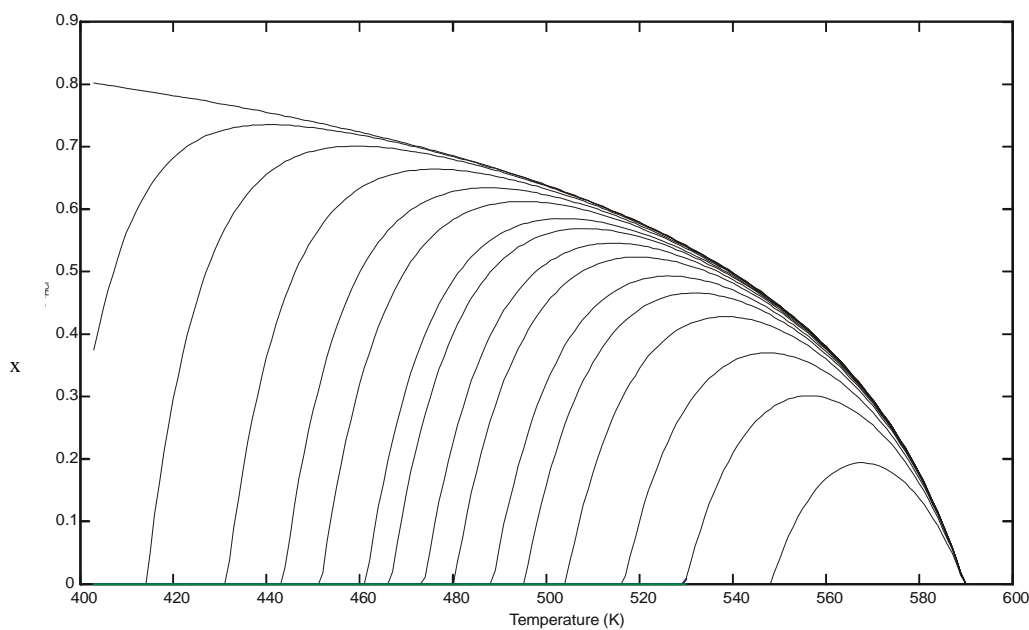
Den sker i 2 reaktorer med mellanliggande kylning. Inflödet består av 40% A och resten inert (I).

Temperatur inflöde till reaktor 1, $T_{f1}$	177 °C
Totalmolflöde in till anläggningen: $F_{totf}$	10 mol/s
Temperatur till andra reaktorn, $T_{f2}$	167 °C
Reaktionsvärme, $\Delta H_R$ (kan antas konstant)	-61.56 kJ mol <sup>-1</sup>
Värmekapacitet, $c_{pA}$	69.3 J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Värmekapacitet, $c_{pB}$	79.3 J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Värmekapacitet, $c_{pI}$	75.3 J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Flöde, $q$	3 m <sup>3</sup> /s
Pre-exponentiell faktor för framåt reaktion, $A_f$	10 <sup>11</sup> s <sup>-1</sup>
Aktiveringsenergi för framåt reaktion, $E_f$	120 kJ/mol
Pre-exponentiell faktor för bakåt reaktion, $A_b$	2 · 10 <sup>4</sup> s <sup>-1</sup>
Aktiveringsenergi för bakåt reaktion, $E_b$	58.44 kJ/mol
Allmänna gaskonstanten, $R$	8.314

$C_p$  kan antas vara oberoende av temperatur inom detta temperaturintervall.

Varken volym skall de 2 reaktorerna ha för att **optimera kostnadseffektiviteten för hela anläggningen?**

Motivera! Om diagrammet nedan används för lösningen skall det bifogas till lösningarna och tentamenskod och sidnummer skrivas högst upp.



Uppgift 5 (6 poäng)

- a) En första ordningens vätskefasreaktion sker i en tankreaktor. Reaktionen sker på sfärsika katalysatorpartiklar. Både film och portransportmotstånd är viktiga. Sätt upp balanser för detta system. Beskriv lösningsgången noggrant för att räkna ut koncentrationen av A ut från reaktorn. Det krävs ej att ekvationerna löses.

Molflöde in i reaktorn:	$F_{\text{tot},f}$
Molfraktion A i inflödet:	$y_{Af}$
Hastighetskonstanten:	$k$
Volymen:	$V$
Flödet:	$q$
Effektiv diffusivitet:	$D_{\text{eff}}$
Partikel radie	$r_p$
Massöverföringskoefficient	$k_c$

- b) En seriereaktion sker på en katalysator



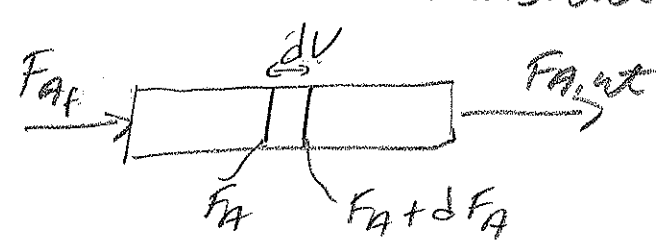
Hur förändras selektiviteten för att producera produkten B av yttre masstransport?  
 Reaktionerna är första ordningen och de sker isotermt.  
 Motivera!

Tenta 09/2/19, KKR100

①

7.  $r = k \cdot C_A^2 \quad \left( \frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{m}^3} \right)$

a) Tubreaktor. Transient materialbalans.



$$F_A - (F_A + dF_A) - 3k C_A^2 \cdot dV = \frac{dN_A}{dt}$$

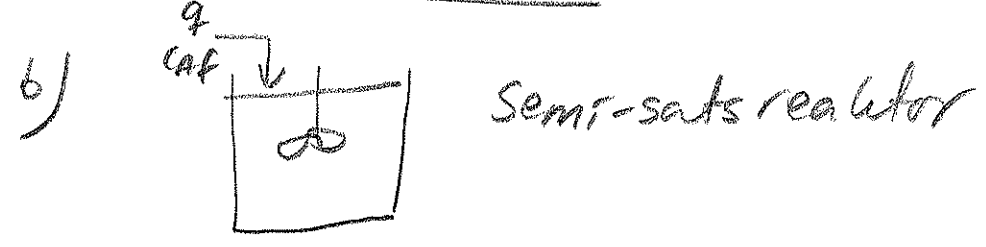
$$-dF_A - 3k C_A^2 dV = \frac{dN_A}{dt}$$

$$N_A = V \cdot C_A \quad dN_A = dV dC_A$$

$$-dF_A - 3k C_A^2 dV = dV \frac{dC_A}{dt}$$

Dividera med dV

$$\frac{dF_A}{dV} = -3k C_A^2 - \frac{dC_A}{dt}$$



$$\text{MB: } q C_{Af} - 3k C_A^2 \cdot V = \frac{dN_A}{dt}$$

$$N_A = C_A \cdot V \quad V = V_0 + q t$$

$$\frac{dN_A}{dt} = V \cdot \frac{dC_A}{dt} + C_A \frac{dV}{dt}$$

↑ q

②

$$\frac{dN_A}{dt} = (V_0 + q t) \frac{dc_A}{dt} + c_A \cdot q$$

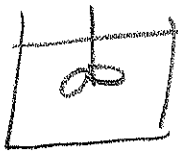
$$(V_0 + q t) \frac{dc_A}{dt} + c_A \cdot q = q c_{A,f} - 3k c_A^2 \cdot (V_0 + q t) \quad (7)$$

Efter hur lång tid är reaktorn full;  $t_{full}$   
 Vilken konc. finns då?

$$t_{full} = \frac{V_{full} - V_0}{q}$$

Integrera ekv. 7 från 0 till  $t_{full}$  och  $c_{A,0}$  till  $c_{A,full}$ .

Nu en sats reaktor



$$-3k c_A^2 \cdot V_{full} = \frac{dN_A}{dt}$$

↑  
konstant

$$\frac{dN_A}{dt} = V_{full} \cdot \frac{dc_A}{dt}$$

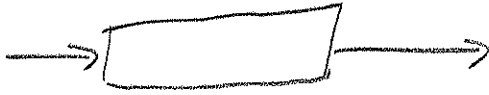
$$-3k c_A^2 \cdot V_{full} = V_{full} \cdot \frac{dc_A}{dt}$$

$$\frac{dc_A}{dt} = -3k c_A^2 \quad \int_{c_{A,full}}^{c_A} \frac{dc_A}{c_A^2} = -3k \int_0^{t_{full}} dt \quad (2)$$

Lös ekv. (2) för ett visst  $t$  ( $t > t_{full}$ ) då  
 erhålls motsvarande  $c_A$ .



2.



$$x_A = 0,3$$

$$L = 60 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

$$d = 20 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

$$q = 3000 \cdot 10^{-6} / 60 \text{ m}^3/\text{s}$$

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

Bestimme  $k$ :

$$-dF_A = k C_A dV$$

$$F_A = q \cdot C_A \quad dF_A = q dC_A$$

$$-q dC_A = k C_A dV$$

$$-q \int_{C_{Af}}^{C_{A, \text{out}}} \frac{dC_A}{C_A} = k \int_0^V dV$$

$$-q [\ln C_A]_{C_{Af}}^{C_{A, \text{out}}} = kV$$

$$-q \ln \frac{C_{A, \text{out}}}{C_{Af}} = kV$$

$$k = -\frac{q}{V} \ln \frac{C_{A, \text{out}}}{C_{Af}} = -\frac{q}{V} \ln \frac{C_{Af}(1-x)}{C_{Af}} = -\frac{q}{V} \ln(1-x)$$

$$\underline{\underline{k = 0,95 \text{ s}^{-1}}}$$

(3)

$$Pe = \frac{v \cdot L}{D_A}$$

$$q = v \cdot A \quad A = \frac{\pi d^2}{4} = 7,85 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2$$

$$v = \frac{q}{A} = 0,106 \text{ m/s}$$

$$Pe = 6,37$$

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} (1 - \exp(-Pe)) = 0,265$$

$$n = \frac{\sigma^2}{\sigma^2} = \frac{1}{0,265} = 3,8 \approx \underline{\underline{4}}$$

Tank serie



$$V_{\text{tank}} = \frac{V_{\text{total}}}{n} = \frac{2,36 \cdot 10^{-6}}{4} = 5,89 \cdot 10^{-7}$$

$$q \cdot C_{Ain} - q \cdot C_{A,ut} - k C_{A,ut} V_{\text{tank}} = 0$$

$$C_{A,ut} (q + k V_{\text{tank}}) = q \cdot C_{Ain}$$

$$C_{A,ut} = \frac{q C_{Ain}}{q + k V_{\text{tank}}}$$

$$C_{A,ut,1} = 281,2 \text{ mol/m}^3$$

$$C_{A,ut,4} = 231,6 \text{ mol/m}^3$$

$$C_{A,ut,2} = 263,6 \text{ mol/m}^3$$

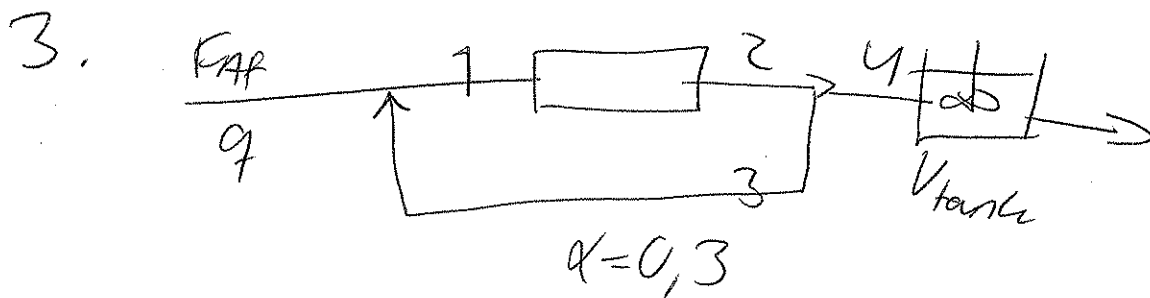
$$C_{A,ut} = (1-x) \cdot C_{Af}$$

$$1-x = \frac{C_{A,ut}}{C_{Af}}$$

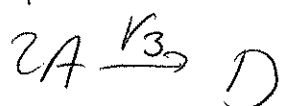
$$C_{A,ut,3} = 247,0 \text{ mol/m}^3$$

$$x = 1 - \frac{C_{A,ut}}{C_{Af}} = 0,23 //$$

(5)



$$V = 0,85$$



MB over tub

$$F_A - (F_A + dF_A) - (k_1 C_A + 2k_2 C_A) dV = 0$$

$$-dF_A = (k_1 C_A + 2k_2 C_A) dV$$

$$dF_A = q dC_A$$

$$-q dC_A = (k_1 + 2k_2) C_A dV$$

$$-q \int_{C_{A1}}^{C_{A2}} \frac{dC_A}{C_A} = (k_1 + 2k_2) \int_0^{V_{tub}} dV$$

$$-q \int_{C_{A1}}^{C_{A2}} \frac{dC_A}{C_A} = (k_1 + 2k_2) \int_0^{V_{tub}} dV$$

$$-q \ln \frac{C_{A2}}{C_{A1}} = (k_1 + 2k_2) \cdot V_{tub}$$

$$\frac{C_{A2}}{C_{A1}} = \exp\left(\frac{-(k_1 + 2k_2) \cdot V_{tub}}{q}\right) = 0,643$$

$$C_{A1} = \frac{C_{A2}}{0,643} = 279,8$$

$$q + q_3 = q_1 \quad q_1 = q_2 \quad q_4 = q$$

$$q_3 = 0,3 \cdot q_2$$

$$q + 0,3 q_2 = q_2 \quad 0,7 q_2 = q$$

$$q_2 = \frac{q}{0,7} \quad q_1 = \frac{q}{0,7} \quad q_3 = \frac{0,3}{0,7} q$$

$$C_{A3} = C_{A2} = C_{A4} = 180$$

$$C_{A_{ut}} = C_{AF} (1 - 0,85) = 45 \text{ mol/m}^3$$

$$F_{AF} = q C_{AF} \quad C_{AF} = \frac{F_{AF}}{q} = 300 \text{ mol/m}^3$$

MB over tank:

$$q C_{A4} - q C_{A_{ut}} - (k_1 C_{A_{ut}} + 2k_2 C_{A_{ut}}) \cdot V_{\text{tank}} = 0$$

$$(k_1 C_{A_{ut}} + 2k_2 C_{A_{ut}}) \cdot V_{\text{tank}} = q C_{A4} - q C_{A_{ut}}$$

$$V_{\text{tank}} = \underline{\underline{3,3 \text{ m}^3}}$$

#### 4. Värmebalans

$$\sum F_{of} \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{pc} dT - \sum F_{ot} \int_{T_{ref}}^{T_{ut}} c_{pc} dT +$$

$$+ F_{Af} X_A (-\Delta H) = 0$$

$$T_{ref} = T_{ut}$$

$$\sum F_{of} c_{pc} (T_m - T_{ut}) + F_{Af} \cdot X_A (-\Delta H) = 0$$

$$X_A = \frac{\sum F_{of} c_{pc} (T_{ut} - T_m)}{F_{Af} \cdot (-\Delta H)}$$

$$X_7 = 0,3$$

(grafisk lösning)

$$T_1 = 555 \text{ K}$$

Reaktor 2:

$$\sum F_{of} c_{pc} (T_{2f} - T_{ut}) + F_{Af} \cdot (X_2 - X_7) \cdot (-\Delta H) = 0$$

$$X_2 - X_7 = \frac{\sum F_{of} c_{pc} (T_{2f} - T_{ut})}{F_{Af} (-\Delta H)}$$

$$X_2 = 0,53 \quad T_2 = 518 \text{ K}$$

MB tank 1:

$$F_{Af} - F_{Af}(1 - X_7) - k_{fi} C_A \cdot V_1 + k_{bi} C_B \cdot V_1 = 0$$

$$F_{Af} - F_{Af} + F_{Af} \cdot X_7 = k_{fi} C_A \cdot V_1 - k_{bi} C_B \cdot V_1$$

$$V_1 = \frac{F_{Af} \cdot X_7}{(k_{fi} C_A - k_{bi} C_B)}$$

$$k = A \cdot e^{-E_A/RT} \quad F = q \cdot C$$

$$C_A = \frac{F_A}{q} = \frac{F_{Af}(1 - X_7)}{q}$$

$$C_B = \frac{F_{AF} \cdot X_7}{q}$$

$$V_7 = \frac{F_{AF} \cdot X_7}{k_{f1} \cdot \frac{F_{AF}(1-X_7)}{q} - \frac{k_{b1} \cdot F_{AF} \cdot X_7}{q}} = 2,7 \text{ m}^3$$

MB tank 2

$$F_{AF}(1-X_7) - F_{AF}(1-X_2) - k_{f2} C_A \cdot V_2 + k_{b2} C_B \cdot V_2 = 0$$

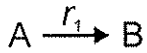
$$F_{AF} - F_{AF} \cdot X_7 - F_{AF} + F_{AF} X_2 - k_{f2} C_A V_2 + k_{b2} C_B V_2 = 0$$

$$F_{AF}(X_2 - X_7) - k_{f2} C_A V_2 + k_{b2} C_B V_2 = 0$$

$$V_2 = \frac{F_{AF}(X_2 - X_7)}{k_{f2} C_A - k_{b2} \cdot C_B} = 5,2 \text{ m}^3$$

## Uppgift 4 (6 poäng)

Reaktionen



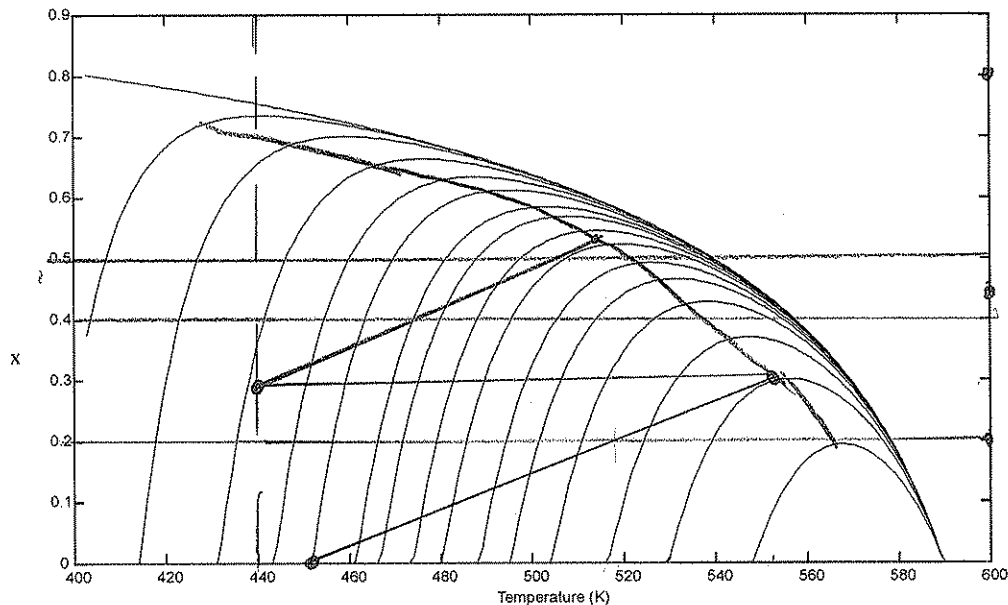
Skер i 2 reaktorer med mellanliggande kyning. Inflödet består av 40% A och resten inert (I).

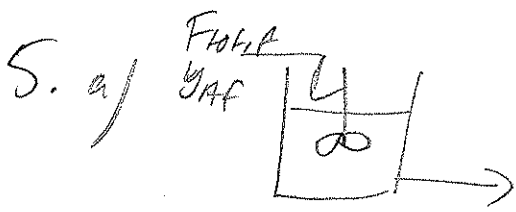
Temperatur inflöde, $T_f$	177 °C
Totalmolflöde in till anläggningen: $F_{totf}$	10 mol/s
Temperatur till andra reaktorn, $T_{l2}$	167 °C
Reaktionsvärme, $\Delta H_R$ (kan antas constant)	-71.56 kJ mol <sup>-1</sup>
Värmekapacitet, $c_{pA}$	29.3 (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
Värmekapacitet, $c_{pB}$	60.0 (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
Värmekapacitet, $c_{pI}$	45.3 (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )

$C_p$  kan antas vara oberoende av temperatur inom detta temperaturintervall.

- Vilken volym skall de 2 reaktorerna ha för att **optimera effektiviteten för hela anläggningen**?
- Vilken volym skall de 2 reaktorerna ha om man istället vill **maximera omsättningsgraden**?

Motivera! Om diagrammet nedan används för lösningen skall det bifogas till lösningarna och namn och sidnummer skrivas högst upp.





$$r = \eta \cdot k \cdot c_{A,s}$$

MB:

$$q \cdot c_{A,f} - q \cdot c_{A,bulk} - r \cdot V = 0$$

$$q \cdot c_{A,f} - q \cdot c_{A,bulk} - \eta \cdot k \cdot c_{A,s} \cdot V = 0$$

Filmmodell:  $k_c \cdot (c_{A,bulk} - c_{A,s}) = \eta \cdot k \cdot c_{A,s}$

$$k_c \cdot c_{A,bulk} - k_c \cdot c_{A,s} = \eta \cdot k \cdot c_{A,s}$$

$$c_{A,s} (\eta \cdot k + k_c) = k_c \cdot c_{A,bulk}$$

$$c_{A,s} (\eta \cdot k + k_c) = k_c \cdot c_{A,bulk}$$

$$c_{A,s} = \frac{k_c}{\eta \cdot k + k_c} \cdot c_{A,bulk}$$

$$q \cdot c_{A,f} - q \cdot c_{A,bulk} - \eta \cdot k \cdot V \cdot \frac{k_c}{\eta k + k_c} \cdot c_{A,bulk} = 0$$

$$y_{AF} \cdot F_{00,f} = q \cdot c_{A,f}$$

$$c_{A,f} = \frac{y_{AF} \cdot F_{00,f}}{q}$$

$$\theta = r_p \sqrt{\frac{k}{D_{eff}}}$$

$$\eta = \frac{3}{\theta} \left( \frac{1}{\tanh \theta} - \frac{1}{\theta} \right)$$