

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

Onsdagen den 7 april 2010 kl 8:30-13:30 i VV-salarna

Examinator: Docent Louise Olsson, tel. 031-772 4390

Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare
Formelsamlingar utgiven av institutionen
TEFYMA
Standard Mathematics Handbook
beta Mathematics Handbook
Physics Handbook
Handbook of Chemistry and Physics

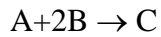
Ej tillåtna hjälpmedel

Kursbok, "Elements of Chemical Reaction Engineering"
Kompendium I KRT
KRT övningsbok
Lösta exempel



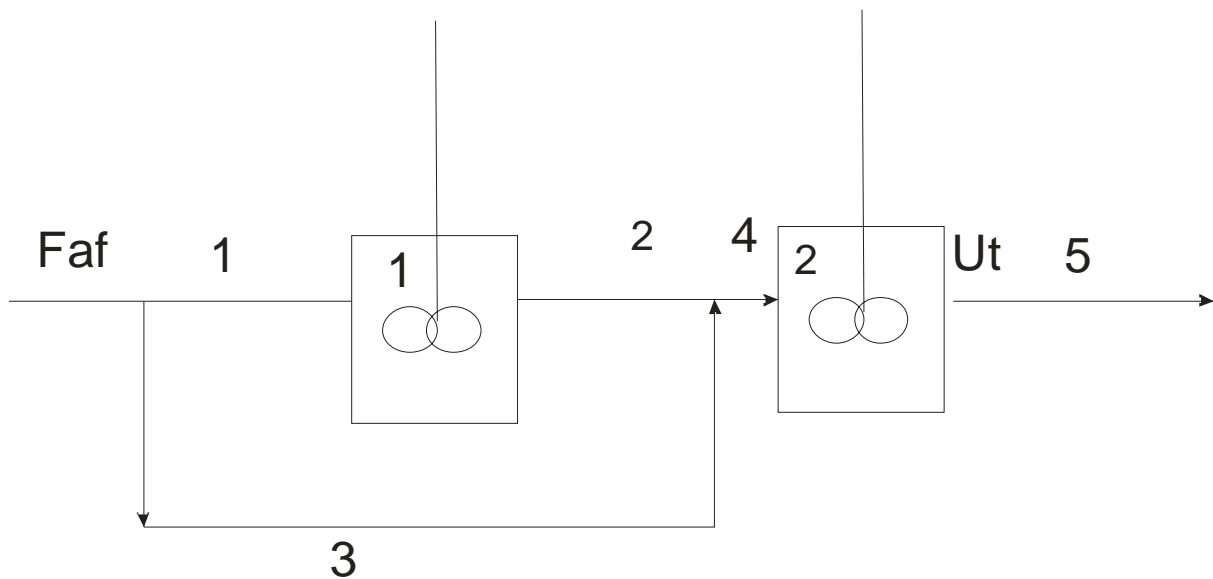
Uppgift 1 (6 poäng)

Följande **gasfasreaktion** sker i en process:



Vad är omsättningsgraden av reaktanten A?

Reaktionen är av första ordning map A ($r = kC_A$).



DATA:

Volymen V1:	1 m ³
Volymen V2:	3 m ³
Flöde in till hela systemet, qf	0.18 m ³ /s
Hastighetskonstant, k	3.5 s ⁻¹
Startkoncentration av A, cAf:	400 mol/m ³
Startkoncentration av B, cBf:	800 mol/m ³
Andel av flödet som går förbi reaktor 1:	20 %
Tryck	1 atm
Temperatur	400 K
Allmänna gaskonstanten, R	8.314

Uppgift 2 (6 poäng)

För att undersöka idealiteten hos en cylindrisk tubreaktor utförs ett spårämnesförsök, som finns i tabellen nedan. Reaktionen ($A \rightarrow B$) är av första ordningen map A.

t (min)	c (mol/m ³)
1	0
2	2
5	7
6	10
9	8
11	3
14	0

Följande data gäller:

Hastighetskonstanten, k	0.20 min ⁻¹
Initial koncentration av A, c _{Af}	400 mol/m ³
Reaktionshastigheten, r=kC _A	

- Härled** ett uttryck för att beräkna omsättningsgraden med segregationsmodellen.
Motivera tydligt!
- Beräkna omsättningsgraden med segregationsmodellen.
- Om du istället hade använt dispersionsmodellen hade du då förväntat dig ett annat svar? **Motivera!**

Uppgift 3 (6 poäng)

- a) Rita upp ett X-T diagram (omsättning, temperatur) för både en exoterm och en endoterm process. Rita ut kurvor för konstant reaktionshastighet och jämviktskurva. Markera tydligt vilka kurvor som är vilka.
- b) Ta fram ekvationen för driftlinjen och beskriv hur man använder den och rita in den i ditt diagram. Gör detta både för en exoterm reaktion och för en endoterm reaktion.
- c) Hur påverkas driftlinjen av att mer inert ämne tillförs? Hur påverkas omsättningsgraden av detta? Motivera med ekvationen och lägg även in i diagram. Gör det både för en exoterm reaktion och för en endoterm reaktion.

Uppgift 4 (6 poäng)

- a) I en parallell reaktion bildas produkten D som är önskad. Tyvärr bildas även U (oönskad). Reaktionen är i gasfas. Beskriv 3 sätt för att maximera selektiviteten av produkten D. Motivera tydligt!



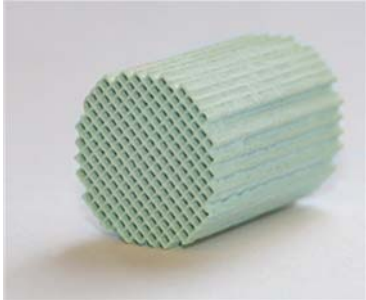
$$\begin{array}{l}
 r_D = k_1 C_A \\
 r_U = k_2 C_A^2
 \end{array}$$

- b) Reaktionen $A \rightarrow B$ sker i en reaktorkombination (en eller flera reaktorer). Vilken reaktorkombination skall du välja för att minimera den totala reaktorvolymen för följande 3 fall:
- $r = k C_A^2$
 - $r = k$
 - $r = 1/(k*(X-0.5)^2)$

Där C_A är koncentrationen av ämne A, X omsättningsgraden och k hastighetskonstanten.

Uppgift 5 (6 poäng)

På KCK här på Chalmers har vi en reaktor där vi använder en monolitkatalysator (bild se nedan). En monolit består av ett antal parallella kanaler. Det aktiva materialet sitter som ett tunt skikt på väggarna.



Monolitens längd: 3cm

Monolitens diameter: 2.1 cm

Kanal diameter: 1mm (kvadratiska kanaler)

Flöde: 3500 ml/min

Axiell dispersion: $10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

- a) En modell skall göras för denna katalysator. En kanal används i modellen (alla kanaler antas vara identiska). En tankseriemodell används för att beskriva gaskoncentrationerna. Hur många tankar skall man använda i modellen?
- b) Sätt upp balanser och beskriv hur du skall beräkna profilen av CO i en monolitkanal. (Inga ekvationer behöver lösas, men sätt upp ekv. och beskriv i detalj hur du skulle gå tillväga).
Gasinflödet består av 10% O_2 , 500 ppm CO och resten av inert N_2 . Förklara införda beteckningar. Hänsyn måste tas till yttre masstransport. Moländring i gasfas kan försummas pga låg CO halt.
 $r = k_{\text{CO}} C_{\text{CO}} / (1 + K_{\text{CO}} C_{\text{CO}})$. Temperaturen kan antas konstant.

Tenta 7 april 2010 (KKR100) ①

1. Moländring!



Sökt: X_A

In till systemet: $F_{Af} = 9 C_{Af} = 72$

$$F_{B1} = 0,8 \cdot F_{Bf} \quad F_{A1} = 0,8 F_{Af}$$

$$F_{B3} = 0,2 \cdot F_{Bf} \quad F_{A3} = 0,2 F_{Af}$$

Reaktor 1:

$$F_{A1} - F_{A2} - k C_{A2} V_1 = 0$$

$$C_{A2} = y_{A2} \cdot C_{tot} = y_{A2} \cdot \frac{P}{RT}$$

$$y_{A2} = \frac{F_{A2}}{F_{tot}} = \frac{F_{A1}(1-X)}{F_{A1} + F_{B1} - 2F_{A1} \cdot X}$$

In	Ut
F_{A1}	$F_{A1} \cdot (1-X)$
F_{B1}	$F_{B1} - 2F_{A1} \cdot X$
F_{C1}	$F_{A1} \cdot X$

$$\begin{aligned} F_1 \quad F_{tot,2} &= F_{A1} - F_{A1} \cdot X + F_{B1} - 2F_{A1} \cdot X + F_{A1} \cdot X = \\ &= F_{A1} + F_{B1} + 2F_{A1} \cdot X \end{aligned}$$

$$F_{A1} - F_{A1} \cdot (1-x) - k \cdot V_1 \cdot C_{tot} \cdot \frac{F_{A1} \cdot (1-x)}{F_{A1} + F_{B1} - 2F_{A1} \cdot x} = 0 \quad \textcircled{2}$$

$$\Rightarrow x_1 = 0,474$$

$$F_{A2} = F_{A1} \cdot (1-x) = 30,3$$

$$F_{A4} = F_{A2} + F_{A3} = 44,7$$

$$F_{B2} = F_{B1} - 2F_{A1} \cdot x = 60,6$$

$$F_{B4} = F_{B2} + F_{B3} = 89,4$$

$$F_{C2} = F_{C4} = F_{A1} \cdot x = 27,3$$

Reaktor 2 \downarrow geht über reaktor 2

$$F_{A4} - F_{A4} (1-x) - k \cdot V \cdot C_{tot} \cdot \frac{F_{A4}}{F_{A4} + F_{B4} - 2F_{A4} \cdot x} = 0$$

In	Out
F_{A4}	$F_{A4}(1-x)$
F_{B4}	$F_{B4} - 2F_{A4} \cdot x$
F_{C4}	$F_{C4} + F_{A4} \cdot x$

$$0 = F_{A4} - F_{A4}(1-x) - k \cdot V \cdot C_{tot} \cdot \frac{F_{A4} \cdot (1-x)}{F_{A4} + F_{B4} - 2F_{A4} \cdot x}$$

$$\Rightarrow x_2 = 0,472$$

$$F_{A4} + F_{B4} + F_{C4} - 2F_{A4} \cdot x$$

$$F_{AS} = F_{A4} \cdot (1 - X_2) = 23,6 \quad (3)$$

$$X_{\text{neta systemet}} = 1 - \frac{F_{AS}}{F_{AF}} = \underline{\underline{0,67}}$$

$$\left(F_{AS} = F_{AF} (1 - X_{\text{tot}}) \right) \quad 1 - X_{\text{tot}} = \frac{F_{AS}}{F_{AF}} \quad X_{\text{tot}} = 1 - \frac{F_{AS}}{F_{AF}}$$

2. $\frac{dN_A}{dt} = -k C_A \cdot V$

$$N_A = C_A \cdot V = C_{AF} (1-x) \cdot V$$

$$\frac{dN_A}{dt} = -C_{AF} \cdot V \cdot \frac{dx}{dt}$$

$$\cancel{C_{AF} \cdot V} \frac{dx}{dt} = k \cancel{C_{AF} (1-x) \cdot V}$$

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

$$\frac{dx}{1-x} = kt$$

$$[\ln(1-x)]_0^x = kt$$

$$-\ln(1-x) + \ln 1 = kt$$

= 0

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

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

$$E = \int_0^{\infty} c dt = 65,5$$

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} (1 - e^{-kt}) \cdot E(t) dt = \underline{\underline{0,73}}$$

5. a) Antal kanaler, $n = \frac{\frac{\pi \cdot z^2}{4}}{1.1} = 346$ (5)

$$F_{\text{channel}} = \frac{3500 \cdot 10^{-6}}{60 \cdot 346} \text{ m}^3/\text{s} = 1,68 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$$

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

Dispersionsmodell:

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} = \frac{z}{Pe_r} - \frac{z}{Pe_r^2} (1 - \exp(-Pe_r))$$

$$Pe_r = \frac{UL}{D_a} \left(\frac{\text{m} \cdot \text{m}}{\text{s} \cdot \frac{\text{m}^2}{\text{s}}} = 1 \text{ OK} \right)$$

$$U = \frac{F_{\text{channel}}}{A_{\text{channel}}} = 0,17 \text{ m/s}$$

$$Pe_r = 505$$

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} = 0,0040 \quad n = \underline{\underline{253 \text{ st.}}}$$

(nära 1 tub!)